

V Simposio de Química 2015



V SIMPOSIO DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD DEL VALLE 2015

La FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS,
Departamento de Química y
Posgrados en Ciencias - Química

INVITAN:

Inscripciones **Gratuitas**

OCTUBRE 14 - 16 DE 2015

Aud. Ángel Zapata - Biblioteca Mario Carvajal

Año Internacional de la Luz y las Tecnologías basadas en la Luz

Año Internacional de los Suelos



**V Simposio de Química
Universidad del Valle
2015**

V Simposio de Química 2015

El V Simposio de Química 2015 tiene como objetivo traer a nuestra región los investigadores de más alto prestigio a nivel mundial para fomentar el intercambio de ideas, estableciendo colaboraciones entre los diferentes grupos de investigación y entre las instituciones académicas al mismo tiempo pretende incentivar a los estudiantes de pregrado y posgrado a mostrar, en modalidad de poster, sus trabajos de investigación fomentando la divulgación de los resultados y la discusión de los mismos.

V Simposio de Química 2015

Contenido

COMITÉ ORGANIZADOR	5
Apoyan.....	6
Agradecimientos	7
Conferencistas.....	8
Programación	15
Lista de ponentes	17
Resúmenes.....	20

V Simposio de Química 2015

COMITÉ ORGANIZADOR

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA - UNIVERSIDAD DEL VALLE

V Simposio de Química 2015

Apoyan



ACADEMIA COLOMBIANA
DE CIENCIAS EXACTAS,
FÍSICAS Y NATURALES



V Simposio de Química 2015

Agradecimientos

El Departamento de Química desea agradecer a todas las personas e instituciones que hicieron posible el desarrollo de este evento.

V Simposio de Química 2015

Conferencistas

MANUEL SALVADOR PALENCIA LUNA, Dr. Sc.



Químico de la Universidad de Córdoba (Montería) y Doctor en Ciencias con mención en Química de la Universidad de Concepción (Chile, 2010). Fue Investigador en el Centro de Investigación de Polímeros Avanzados (CIPA-Chile) y actualmente se desempeña como Profesor Asistente del Departamento de Química de la Universidad del Valle. Es miembro del Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas, GI-CAT, donde trabaja en el desarrollo y aplicación de sistemas poliméricos, de membranas, nanotecnológicos, bioinspirados y agrícolas. Ha sido conferencista invitado por la Sociedad Chilena de Química en el Coloquio de Macromoléculas (2014) y lo es para el Congreso Iberoamericano de Materiales (2015). Posee actualmente un total de 24 publicaciones científicas en revistas internacionales, es coautor de dos capítulos de libros de la editorial Springer y dos solicitudes de patente presentadas ante la INAPI-Chile.

Título de la conferencia:

La química en la ciencia del suelo: Estado actual y perspectivas.

V Simposio de Química 2015

TATIANA SANCHEZ MOTTA, Ph.D.



Química de la Universidad del Valle, Master en Catálisis de la Universitat Rovira i Virgili de Tarragona, España, Ph.D. en Ciencia y tecnología química de la Universitat Rovira i Virgili de Tarragona, España. Durante su doctorado trabajó en síntesis de materiales microporosos y mediante tecnología microondas y ultrasonido logró la transformación de estos en materiales mesoporosos; los cuales mediante intercambio con diferentes metales como Cobre, Hierro y Zinc, se emplearon en reacciones de hidrogenólisis, principalmente de glicerol para la obtención de 1,2-butanodiol; siendo estos resultados útiles para el desarrollo de materiales de intercambio iónico en investigaciones futuras en catálisis heterogénea y materiales de adsorción.

A su regreso a Colombia se vinculó con el Centro de Investigación de la Caña de Azúcar de Colombia (Cenicaña) como Química jefe; lugar en el que adelanta investigaciones orientadas a resolver conflictos del sector azucarero, generar alternativas y soluciones que permitan ahorros en los procesos y a la obtención de subproductos que le brinden valor agregado al proceso de fabricación de azúcar y etanol.

Título de la presentación:

Caña de azúcar: Un camino de oportunidades

V Simposio de Química 2015

WILLIAM CAPELUCI, Químico



Trabajó para la Mercedes-Benz de Brasil, en São Bernardo do Campo - SP durante 20 años, 16 de ellos en el Laboratorio de Investigación y Desarrollo como analista de materiales en control de calidad en procesos de manufactura y producción, involucrando análisis de polímeros, adhesivos, metales, pintura, lubricantes y combustible. Desde 2012 está vinculado a TA Instruments como especialista de aplicaciones ofreciendo soporte y entrenamiento para clientes con equipos de TA Instruments, además de apoyar desarrollos e interpretación de resultados.

V Simposio de Química 2015

RICARDO PERAZA SALAZAR, Químico



Químico egresado de la Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá en 1984, realizó un diplomado en gestión pública y es especialista en Química Analítica instrumental mediante capacitaciones recibidas a nivel internacional en compañías como Pekín-Elmer, Hewlett-Packard, Beckman-Coulter, Foss y Shimadzu. Actualmente es asesor comercial de Purificación y Análisis de Fluidos área Instrumental y es conocedor de técnicas analíticas basadas en espectroscopia UV-VIS, NIR, AA, ICP y FTIR, cromatografía de gases, cromatografía líquida con acoplamiento a espectrometría de masas y sistemas de análisis bromatológicos. También ha sido coordinador del Laboratorios de aguas de la Empresa de acueducto y Alcantarillado de Bogotá, director de calidad de productos fitosanitarios Proficol y docente de Química instrumental en la UDCA.

V Simposio de Química 2015

HÉCTOR AUGUSTO TORRES CASTILLO, Químico farmaceuta



Químico farmacéutico egresado de la Universidad Nacional de Colombia, Diplomado en gestión gerencial de la Universidad Javeriana, se ha desempeñado como asesor de aplicaciones entre el año 1993 y 2000 y gerente comercial de la Unidad Instrumental de Purificación y Análisis de Fluidos Ltda desde el año 2000. Durante su trayectoria laboral ha recibido capacitación internacional en tecnologías analíticas como HPLC, NIR, GC, AA, FTIR, UV, TOC, análisis proximal y Disolución de Productos Farmacéuticos y se ha desempeñado como capacitador en las mismas a nivel nacional y de sur América. Su experiencia en análisis instrumental en la industria le ha dado conocimiento para impartir capacitaciones internacionales en temas de Buenas prácticas de laboratorio y Validación de técnicas analíticas en México y Chile.

Título del minicurso:

GC y GCMS enfocado a aplicaciones en análisis de suelos.

V Simposio de Química 2015

LINO FERNANDO ROMÁN HERRERA, Químico



Químico egresado de la Universidad del Quindío con experiencia en análisis en diferentes industrias entre las cuales: Farmacéutica, Alimentos y Ambiental. Actualmente Ingeniero de Servicio Técnico de la unidad de Instrumental.

Título de la conferencia:

La Espectroscopia de Infrarrojo cercano con transformadas de fourrier y sus aplicaciones en análisis de suelos.

V Simposio de Química 2015

LUIS ANTONIO LADINO MORENO, Ph.D.



Químico de la Universidad del Valle con Maestría en Ciencias Químicas (Química atmosférica) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Recibió su doctorado en Ciencias Ambientales (Física atmosférica) en Febrero del 2011 del Swiss Federal Institute of Technology (ETH-Zurich, Suiza). Su tesis doctoral consistió en el diseño y la caracterización de una cámara de nube para el estudio de diferentes procesos microfísicos que se llevan a cabo dentro de las nubes. Su primera estancia postdoctoral la realizó en el Departamento de Química de la Universidad de Toronto (Canadá) donde continuó con el estudio de las nubes frías y su impacto en el cambio climático. Actualmente se desempeña como investigador visitante en Environment Canada llevando a cabo mediciones aéreas para caracterizar los cristales de hielo dentro de nubes tropicales. Su segunda estancia postdoctoral fue posible gracias a la beca otorgada por el Natural Sciences and Engineering Research Council (NSERC) de Canadá.

Sus líneas de investigación consisten en la caracterización de las partículas de aerosol, en la interacción de nubes y aerosoles, y en el entendimiento de los diferentes procesos microfísicos que ocurren dentro de las nubes. Sus investigaciones son relevantes tanto para la Tierra como para Marte y son de gran utilidad para el entendimiento del rol que juegan las nubes y los aerosoles en el cambio climático. Además, sus estudios son de vital importancia para la seguridad aérea.

Título de la presentación:

¿Pueden las Nubes Contrarrestar el Calentamiento Global?

V Simposio de Química 2015

Programación

Miércoles 14 de Octubre

Auditorio Ángel Zapata de la Biblioteca Mario Carvajal

9:00 a.m.	Inauguración.
9:15 a.m.	Conferencia “Caña de azúcar: Un camino de oportunidades”. Dra. Tatiana Sánchez. Cenicaña.
10:15 a.m.	Café.
10:30 a.m.	Conferencia “¿Pueden las Nubes Contrarrestar el Calentamiento Global?” Dr. Luis A. Ladino. Investigador - Environment Canada.
2:00 p.m.	Minicurso sobre Análisis Termogravimétrico. Qco. William Capeluci. TA Instruments.
3:30 p.m.	Café.
3:45 p.m.	Minicurso sobre Análisis Termogravimétrico. Qco. William Capeluci. TA Instruments.

Sesión de posters

5:00 – 7:00 p.m. Piso 2, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas.

Jueves 15 de Octubre

Auditorio Ángel Zapata de la Biblioteca Mario Carvajal

9:00 a.m.	Minicurso sobre Calorimetría Diferencial de Barrido. Qco. William Capeluci. TA Instruments.
10:15 a.m.	Café.
10:30 a.m.	Minicurso sobre Calorimetría Diferencial de Barrido. Qco. William Capeluci. TA Instruments.
2:30 p.m.	I Olimpiadas Regionales de Química (Auditorio 5 , Ingenierías).

V Simposio de Química 2015

Auditorio Calima, Piso 2 - Facultad de Ciencias Naturales y Exactas

- 9:00 a.m. Minicurso sobre GC y GCMS enfocado a aplicaciones en análisis de suelos.
- 10:15 a.m. Café.
- 10:30 a.m. Minicurso sobre GC y GCMS enfocado a aplicaciones en análisis de suelos.
- 2:00 p.m. Minicurso sobre GC y GCMS enfocado a aplicaciones en análisis de suelos. Qco. Ricardo Peraza. PAF – Shimadzu.
- 3:30 p.m. Café.
- 3:45 p.m. Minicurso sobre GC y GCMS enfocado a aplicaciones en análisis de suelos. Qco. Farmaceuta Hector Augusto Torres Castillo. PAF – Shimadzu.

Cena de integración

8:00 p.m. Restaurante Simón Parrilla (Av. Pasoancho Carrera 72 # 13-45, Barrio Quintas de Don Simón), Cali. Costo de la cena: 47.000 pesos.

La inscripción puede realizarse con Ginna Rodríguez, en la jefatura del Departamento de Química. Tel: 3212148 Ext 107.

Viernes 16 de Octubre

Auditorio Ángel Zapata de la Biblioteca Mario Carvajal

- 10:00 a.m. Conferencia “La química en la ciencia del suelo: Estado actual y perspectivas.” Dr. Manuel Palencia, Universidad del Valle.
- 11:00 a.m. Conferencia “La Espectroscopia de Infrarrojo cercano con transformadas de fourrier y sus aplicaciones en análisis de suelos”.
Qco Lino Fernando Román Herrera, PAF - Shimadzu.
- 2:30 p.m. Premiación y clausura.

V Simposio de Química 2015

Lista de ponentes

Autor	Página
Abonia Rodrigo.	52,57,59,62,63,66,67,69,70, 73,76,77
Acosta Guzman Paola Andrea	52,72
Afanasjeva Natalia	42
Agredo Diana Marcela	22
Arboleda Diaz Paola Andrea	23
Areválo-Herrera, Myriam	33
Ayala Toro Marcela	41
Becerra Diana Karina	53
Benavides Erika	31,42
Benavides Hidalgo Esteban	32
Benavidez Paola Andrea	54
Benitez Benitez Ricardo	22,24
Berrío Maria Elizabeth	43
Blanco-Tirado C	37
Bolaños Alejandro.	38
Bock, A. D.	49
Bonne Damien	53
Cabrera Espinoza Andrea	55
Cajiao Sanchez Nathalia	44
Calderón-Cárdenas Alfredo	29
Campo D.VH	34
Castañeidas Daydi	33
Castellanos Maria Alejandra	56
Castillo Duvan Fernando	45
Castillo Jorge Enrique	39
Castillo Juan Carlos	57
Castro Castro Jorge Ivan	58
Céspedes Nora	33
Chacon Alexander	45
Chamorro Orue Analia	49
Chaur Manuel N.	54
Cocho José Ángel	33
Colmenares de Velez Ana	75
Combariza M.Y.	37
Constantieux Thierry	53
Coquerel Yoann	57

V Simposio de Química 2015

Cuartas Granada Viviana	59,70
Cuervo O.G.	34
Delgado Lina Marcela	60
Díaz Harold	32
Echeverry Carlos	33
Enriquez Diego Javier	61
Estévez-Braun Ana	74
Forero Giron Angie Carolay	34
Galvez Jaime	76
García Lopez Stephanie Catherine	62
Garcia Perez Andres Camilo	63
Gaviria E.B	22
Godoy César A.	25
Guerrero Caicedo Alejandro	64,65
Gutierrez Tabares Luisa Fernanda	66
Gutierrez V.T.M	34
Haferkamp, S.	49
Hoyos J.L	22
Illicachi Luis Alberto	67
Insuasty Braulio.	52,55,58,59,62,66,67,69,70, 73,76,77,78,79
Insuasty Daniel	62
Isaza Martinez José	75,79
Jaramillo Luz Marina	63,64,65
Larmat, F.	31,32
Larrahondo Jesús	39,45
Lerma Tulio Armando	44,46
Lizcano-Valbuena William H.	29,41
Loaiza, Oscar	41
Lombo Dorado Cristian Alejandro	68
Lopez-Valenzuela Sandra Caterin	69
Luna Galvis Leidy Tatiana	70
Mariño Ocampo Nory Johana	71
Martinez Lara Jina Marcela	35
Mayor Rivera Angelica Maria	50
Mejia Gutierrez Melissa Andrea	72
Mena Ramirez Leidy Vanessa	36
Merz, Klaus	49
Montilla Antonia	26

V Simposio de Química 2015

Montoya-Arias A.	77
Mora Mayra Alejandra	44,47
Moreno-Fuquen Rodolfo	71
Moreno-López Leydi Marcela	73
Mujica- Martinez Cesar Augusto	28
Ocampo-Restrepo Vivianne Karina	29
Orozco Ferley	61
Ortiz Gonzalez Alejandro	52,55,58,78
Páez Martha	35
Palencia Manuel	42,43,44,46,47
Pantoja Christian	38
Pantoja Pulido Kriss Dayana	74,75
Polo Cerón Dorian.	50
Quiroga Jairo	52,57,59,62,66,67,69,70,72, 73,76,77,79
Rada Maite del Pilar	26
Raimondi Wilfried	53
Ramirez Alfonso	26
Ramirez-Prada J.	69,73,77
Ramirez Pradilla Juan Sebastian	37
Restrepo Jaime	23
Rodriguez Fabian Esteban	78
Rodriguez Jean	53,57
Rojas Giovanni	39,56,60,61,68
Romero Castro Carmen	74
Romo Valdés Pablo E.	79
Rosero López Brandon	24
Sanchez Ruben	45
Sinisterra Juan Camilo	25
Soto Diana M.	65
Stiven Polo	76
Torres, W.	31,32
Urresta Julian	41
Usuriaga Mulato Yeniffer	26
Valencia Ángela	33
Vallamiel Guerra Mar	26
Wagener Kenneth	60
Wist Julien	36,38
Yarce Cristian Javier	39

V Simposio de Química 2015

RESUMENES

V Simposio de Química 2015

BIOQUÍMICA Y QUÍMICA DE ALIMENTOS

V Simposio de Química 2015

OPTIMIZACIÓN EN LA DIGESTIBILIDAD *in vitro* DE UNA PAPILLA PREPARADA A BASE DE QUINUA *Chenopodium Quinoa* MEDIANTE HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA DE PROTEÍNAS

Agredo D.M., Benítez B. R.* , Gaviria E.B., Hoyos J.L

Química de Productos Naturales,
Departamento de Química, Universidad del Cauca,
Calle 5 # 4 - 70 Popayán

* e-mail: rbenitez@unicauca.edu.co

Palabras Claves: **Quinoa, hidrólisis enzimática, grado de hidrólisis, digestibilidad in vitro, superficie de respuesta**

Resumen

Los hidrolizados enzimáticos se utilizan ampliamente en la tecnología alimentaria por sus propiedades nutricionales o funcionales. Una de las aplicaciones más importantes de los hidrolizados enzimáticos de proteínas es su utilización como fuente de nitrógeno en la formulación de una dieta con destino a la alimentación infantil y/o de adultos enfermos (Benítez y colaboradores 2008). El objetivo de este trabajo fue optimizar la hidrólisis enzimática de proteínas a base de quinua, mediante el método estadístico de superficie de respuesta, teniendo como parámetros de respuesta grado de hidrólisis y digestibilidad in vitro, con el fin de obtener la formulación de una papilla a base de quinua que suplemente la deficiencia de aminoácidos esenciales que no están presentes en los cereales usados comercialmente. Esto se consiguió realizando pruebas preliminares de hidrólisis enzimática en un montaje para materiales secos, con agitación constante y control de temperatura, luego se procedió a ejecutar el diseño de optimización de hidrólisis enzimática por superficie de respuesta.



Figura 1. Grano de quinua

[1] BENITEZ B.R., IBARZ A., PAGAN J. Hidrolizados de Proteína: procesos y aplicaciones. Acta Bioquímica Latinoamericana. 42 (2008): 227-36.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS Y DETERMINACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE UN COMPLEJO DE INCLUSIÓN EXTRACTO DE CÚRCUMA *longa* Y β CICLODEXTRINA

Paola Andrea Arboleda-Díaz, Jaime Restrepo Ph.D.

Grupo de Investigación Productos Naturales y Alimentos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Cra 100 # 13-00

* e-mail: paola.arboleda@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Ciclodextrinas, Fluidos Supercríticos, Cúrcuma *longa*.**

Resumen

Se estudió la importancia del extracto de Cúrcuma *longa* por medio del análisis de su actividad antioxidante frente al radical libre DPPH. El extracto fue obtenido por la técnica de Fluidos Supercríticos con CO₂ a 2500 psi del cual se identificaron 9 compuestos químicos por Cromatografía de Gases acoplada a detector de Masas. Posteriormente, el extracto se encapsulo con β -Ciclodextrina permitiendo obtener un compuesto más estable, libre de solventes y soluble en agua. El contenido de Fenoles fue de 86.95 ± 6.78 y 35.66 ± 3.13 mg ácido gálico/g extracto seco para el extracto y el complejo respectivamente. El IC₅₀ del extracto y del complejo de inclusión fue de 29.85 ± 0.26 y 107.55 ± 1.64 mg/L respectivamente. Los complejos de inclusión fueron caracterizados por medio de espectroscopia IR, GC-MS, UV y TGA. Mediante un análisis comparativo de los espectros de la β -CD, el extracto y el complejo de inclusión se determinó la efectividad del método de encapsulación.

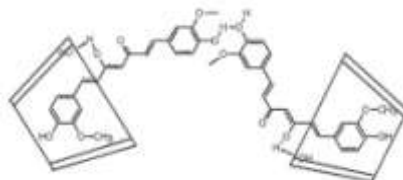


Figura 1. Complejo de Inclusión Curcumina- β -Ciclodextrina.

Referencias

Chassagnez-Mendez, A. L.; Machado, N. T.; Araujo, M. E.; Maia, J. G.; Meireles, M. A. A. Supercritical CO₂ Extraction of Curcumins and Essential Oil from the Rhizomes of Turmeric (*Curcuma Longa* L.). *Ind. Eng. Chem. Res.* 2000, 39, 4729–4733.

López-Tobar, E.; Blanch, G. P.; Ruiz del Castillo, M. L.; Sanchez-Cortes, S. Encapsulation and Isomerization of Curcumin with Cyclodextrins Characterized by Electronic and Vibrational Spectroscopy. *Vib. Spectrosc.* 2012, 62, 292–298.

V Simposio de Química 2015

Extracción de queratina mediante el método de Shindai tradicional y asistido por microondas a partir de residuos de la industria alimenticia (avícola), plumas de pollo (*Gallus gallus*).

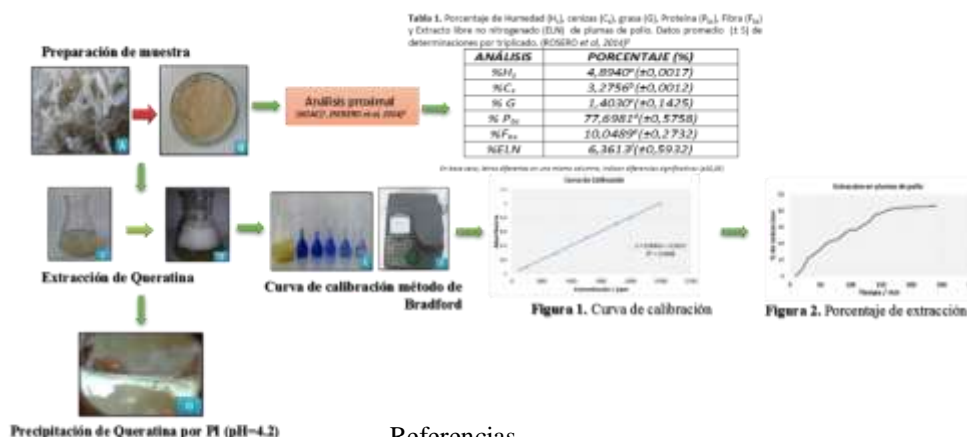
Brandon Rosero López, Ricardo Benítez Benítez*

Química de Productos Naturales (QPN),
Departamento de Química, Universidad del Cauca,
Carrera 2 # 3N – 45, Popayán, Cauca
* e-mail: rbenitez@unicauca.edu.co

Palabras Claves: Queratina, Reactivo de Shindai, Plumas de pollo, Pezuña de vaca

Resumen

Como objetivo se propuso evaluar metodologías y técnicas químicas para el aprovechamiento de subproductos generados por las industrias alimenticias, generando así un valor agregado a lo que se clasifica, como residuos, solventando la contaminación ambiental que estos puedan generar. Para ello se realizó un análisis proximal de las muestra de estudio (AOAC)¹. Se partió de 150,000g, de muestra de plumas de pollo (*Gallus gallus*), se realizó un tratamiento manual y mecánico hasta su pulverizado y se empacó al vacío. Posteriormente la muestra pulverizada; se desengrasó por Soxhlet a 100°C durante 7 horas, se utilizó iso-octano como solvente extractor, se procedió a realizar el análisis por triplicado. Para la extracción de queratina se preparó el reactivo de Shindai (NAKAMURA *et al*, 2002)², el cual está compuesto por una solución de extractora de 25 mM Tris-HCl (pH 8,5), 2,6 M de tiourea, 5 M de urea, y el 5 % de 2-mercaptoetanol, la relación sustrato-solución extractora fue 1:5, la potencia utilizada para el microondas fue 600 W. Se procedió a cuantificar el porcentaje de extracción en función del tiempo por el método de Bradford.



1 Official Methods of Analysis. AOAC. 18th ed. Gaithersburg, MD: The association, 2005

2 NAKAMURA, A., ARIMOTO, M., TAKEUCHI, K. and FUJII, T. A rapid extraction procedure of human hair proteins and identification of phosphorylate species. Biol. Pharm. Bull. 25(5), 2002, p. 569-572.

3 ROSERO LOPEZ, B., BENÍTEZ BENÍTEZ, R., & MARTIN FRANCO, J. (2014). Evaluación de dos materias primas como fuente de proteína: pluma de pollo (*Gallusgallus*) y pezuña de vaca (*Bosprimigeniustaurus*). Ingenium, 8(22), 21-26. Consultado de <http://revistas.usc.edu.co/index.php/Ingenium/article/view/463>

V Simposio de Química 2015

EVALUACIÓN Y DISEÑO DE BIOCATALIZADORES BASADOS EN LIPASAS INMOVILIZADAS COVALENTEMENTE PARA HIDRÓLISIS Y TRANSESTERIFICACIÓN.

J.C.Sinisterra¹, C.A. Godoy^{1*}.

¹GIPAB - Laboratorio de Investigación en Biocatálisis y Biotransformaciones (LIBB)
Departamento de Química, Universidad del Valle.

* e-mail: laboratorio.biocatalisis@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Lipasas, Inmovilización covalente, Aminación, Biocatálisis.**

Resumen

Buena parte de los daños al medio ambiente están relacionados con procesos poco sostenibles para la obtención de energía y derivados petroquímicos. El biodiésel surge como una alternativa más limpia no solo para obtención de energía sino de oleoquímicos de alto valor. Sin embargo, el proceso para su producción implica el uso de una tecnología catalítica homogénea que genera residuos corrosivos e implica uso intensivo de energía y agua. Como alternativa, buscamos obtener biocatalizadores de lipasas inmovilizadas (CALB, TLL, Lecitase y RML) en reacciones de hidrólisis de un éster modelo y de transesterificación de aceite para obtener biodiésel. Nos centramos en obtener *derivados enzimáticos* mediante inmovilización covalente de tales lipasas aminadas y nativas sobre soportes tipo aldehído-agarosa^{1,2}. Los rendimientos de inmovilización fueron mayores para enzimas nativas (a pH 10) frente a sus contrapartes aminadas (a pH 9), siendo el mayor para TLL nativa (87,3%). Sin embargo, la mayor actividad hidrolítica sobre 4-nitrofenilbutirato se obtuvo para el derivado de la enzima CAL B aminada ($9,9 \times 10^3$ $\mu\text{mol}/\text{min-g}_{\text{derivado}}$). Para todos los derivados la actividad de transesterificación fue baja (<7% de conversión) por lo que es un aspecto que buscamos mejorar.

Palabras clave: *inmovilización covalente, lipasas, hidrólisis, transesterificación, aminación.*

- 1) Fernandez-Lorente. G.; Godoy. A. C.; Mendes. A. A.; Lopez-Gallego. F.; Grazu. V.; De la Rivas. B.; Palomo. M. J.; Hermoso. J.; Fernandez-Lafuente. R.; Guisan. M. J. Solid-Phase Chemical Amination of a Lipase from *Bacillus thermocatenulatus* To Improve its Stabilization via Covalent Immobilization on Highly Activated Glyoxyl-Agarose. *Biomacromolecules*. **2008**, 9 (9), 2553-2561.
- 2) Grazu, V.; Betancour, L.; Montes, T.; Lopez-Gallego, F.; Guisan, J. M.; Fernández-Lafuente, R. Glyoxyl agarose: A fully inert and hydrophilic support for immobilization and high stabilization of proteins. *Enzyme Microbial Technology*. **2006**, 38, 60–966.

1-2 Referencias (opcional)

V Simposio de Química 2015

INMOVILIZACIÓN DE LA ENZIMA β -GALACTOSIDASA

Yeniffer Usuriaga Mulato*, Dr. Alfonso Ramírez S., Dra. Mar Villamiel Guerra
Dra. Antonia Montilla, Dra. Maite del Pilar Rada M**(**Directora del grupo)

Grupo de Biotecnología, Calidad Medioambiental y Seguridad Agroalimentaria
(BICAMSA)

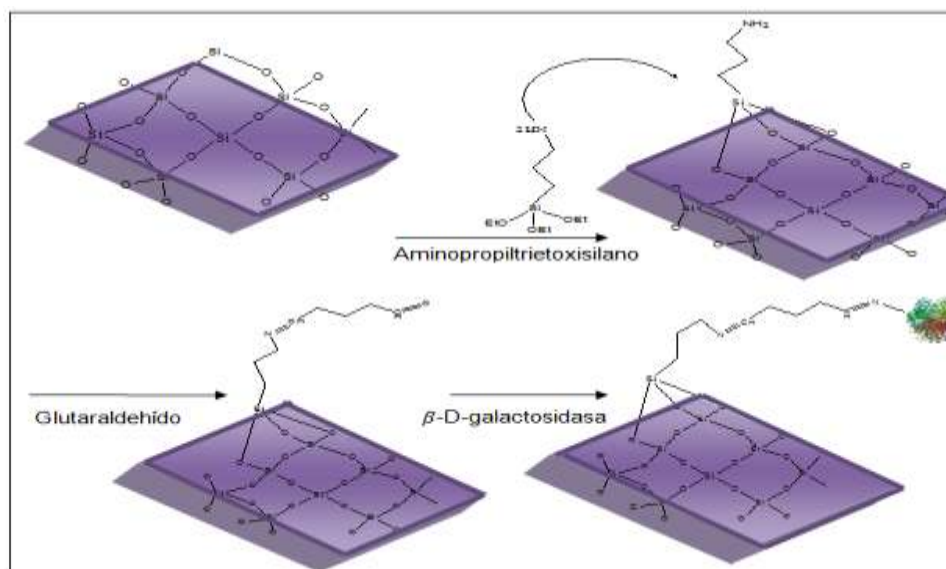
Departamento de Química, Universidad del Cauca,
Calle 5 No. 4-70

* yusuriaga@unicauca.edu.co

Palabras Claves: β -D-galactosidasa, soporte mesoporoso, hidrólisis de lactosa.

Resumen

La intolerancia a la lactosa es uno de los principales problemas que sufre la mayoría de la población mundial; esto ha ocasionado que en los últimos años haya un menor consumo de la leche y sus derivados, debido a que presentan como glúcido mayoritario la lactosa. El uso de la enzima β -D-galactosidasa para la hidrólisis de la lactosa, se ha convertido en una de las estrategias más utilizada en la industria de los alimentos para la maximización del consumo de productos lácteos. Sin embargo el alto costo de la enzima y de los procesos de hidrólisis, permite incursionar en una nueva metodología como es la inmovilización de enzimas, la cual permite llevar a cabo la hidrólisis de la lactosa, de manera más económica y rápida, reduciendo los costos para las empresas. Durante este trabajo se realizó la inmovilización de la enzima β -D-galactosidasa a partir de *Kluyveromyces lactis* sobre un soporte mesoporoso de sílice, por medio de enlace covalente para la hidrólisis de muestras de leche entera comercial, mediante la metodología estandarizada por Rada-Mendoza (2005). Para demostrar su efectividad se realizó la cuantificación de los carbohidratos presentes en la muestra de leche antes y después de la hidrólisis, evaluando la actividad de la enzima y la inmovilización en el soporte mencionado.



V Simposio de Química 2015

FISICOQUÍMICA

V Simposio de Química 2015

Dinámica cuántica de la transferencia excitónica en el complejo biomolecular PE545

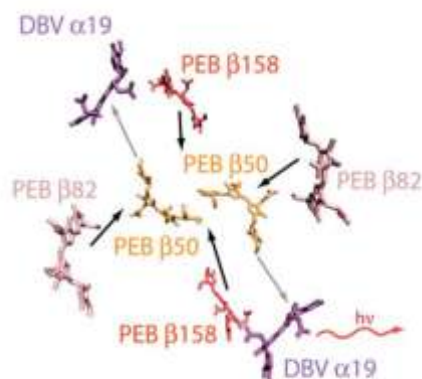
Cesar Augusto Mujica-Martinez

Departamento de Química, Universidad de Nariño,
Ciudadela Universitaria Torobajo - Calle 18 Carrera 50 - Bloque I - San Juan de Pasto
e-mail: cesar_mujica@yahoo.com

Palabras Claves: fotosíntesis, transferencia de energía excitónica, picroeritrina 545 (PE545), *Rhodomonas* CS24, dinámica disipativa, efectos Markovianos

Resumen

La fotosíntesis es un proceso de transferencia excitónica fuera del equilibrio que ocurre en complejos biomoleculares que capturan luz al interior de organismos fotosintéticos en donde se transforma la energía de fotones solares en energía química. Éste proceso ocurre a temperatura ambiente en donde los efectos cuánticos, si existen, son de corta vida debido a que ocurren en un entorno altamente fluctuante. En este trabajo se presentan resultados de la dinámica de transferencia de energía excitónica del complejo biomolecular captor de luz ficoeritrina 545 (Phycoerythrin 545 o PE545) del alga cryptophyta *Rhodomonas* CS24. Los resultados indican una dinámica excitónica sobre-amortiguada que exhibe un comportamiento Markoviano.



V Simposio de Química 2015

DESARROLLO DE NANOCATALIZADORES METÁLICOS CON Pt, Ni y Co PARA LA ELECTRO-OXIDACIÓN DE ETANOL Y ACETALDEHÍDO

Vivianne K. Ocampo-Restrepo¹, Alfredo Calderón-Cárdenas^{2*},
William H. Lizcano-Valbuena¹

¹LICAP - Dpto de Química, Universidad del Valle, A. A. 25360, Cali

²Dpto de Química, Universidad de Nariño, A. A. 1175, Pasto

* e-mail: alfredo.calderon@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Etanol, acetaldehído, electro-oxidación.

Resumen

Celdas de combustible de etanol directo (DEFCs), se muestran como una alternativa energética adecuada por la baja toxicidad, alta densidad energética y disponibilidad tecnológica del etanol. Uno de los inconvenientes de estos sistemas es la incompleta y lenta oxidación anódica del alcohol debido a la fuerte adsorción de intermediarios como el CO y el acetaldehído sobre los catalizadores usados, generalmente basados en Pt. El uso de un segundo o tercer metal es una propuesta para mejorar la eficiencia de la reacción anódica, por lo que en este trabajo se prepararon y caracterizaron por energía dispersiva de rayos X (EDX) catalizadores con Pt, Ni y Co soportados en carbono, a los cuales se les evaluó la respuesta electroquímica por voltamperometría cíclica y la actividad electrocatalítica por cronoamperometría para la electro-oxidación de etanol y también para la oxidación de acetaldehído. De los materiales evaluados el mejor para la oxidación de etanol fue el PtNiCo 51:24:25. La explicación de los efectos del segundo y tercer metal sobre los mecanismos de oxidación y la cinética de la reacción requiere del uso de técnicas espectroscópicas acopladas, experimentos que están por realizarse.

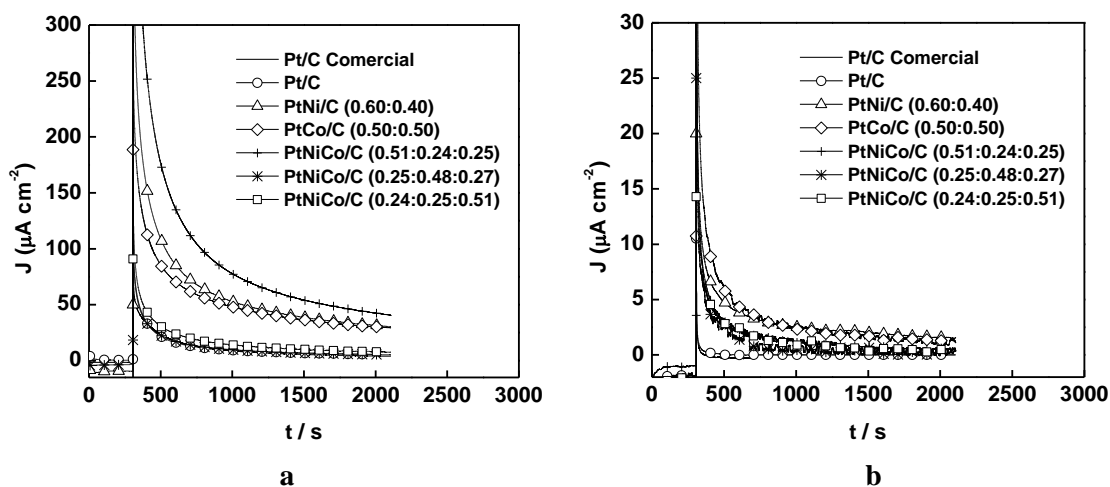


Figura 1. Respuesta cronoamperométrica de catalizadores con 20 % metal/carbono para a. oxidación de etanol, b. oxidación de acetaldehído.

V Simposio de Química 2015

QUÍMICA ANALÍTICA

V Simposio de Química 2015

DETECCIÓN DE SEROTONINA USANDO UN SENSOR ELECTROQUÍMICO BASADO EN LA TECNOLOGÍA DE IMPRESIÓN MOLECULAR (MIPs).

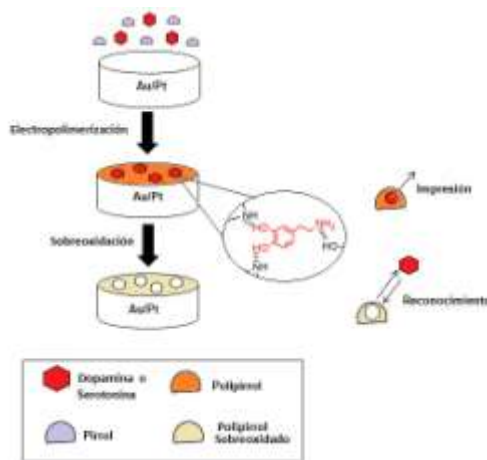
E. Benavides¹, W. Torres¹, F. Larmat^{1*}

¹: Departamento de Química, Grupo de Electroquímica, Universidad del Valle, Cali, Colombia *E-mail: fernando.larmat@correounivalle.edu.co

Palabras Clave: Sensor electroquímico, polímeros impresos molecularmente (MIPs), polipirrol sobreoxidado, serotonina.

Resumen

Se desarrolló un sensor electroquímico para la detección de Serotonina (5-HT) usando la tecnología de impresión molecular sobre polímeros conductores (MIPs). La Serotonina (5-HT) es un importante neurotransmisor que participa en la regulación del comportamiento de los seres humanos. Debido a su importancia biológica, la medición de esta especie es de interés como herramienta de diagnóstico temprano y de seguimiento de enfermedades como la depresión Mayor y Alzheimer. En la construcción del sensor electroquímico se usó un monómero de polímero conductor (pirrol) electropolimerizado sobre microelectrodos de disco de oro (Au) en presencia del analíto (5-HT) en el rango de concentraciones entre 10^{-4} y 10^{-6} M. La síntesis y caracterización del sensor se realizó por técnicas como voltamperometría cíclica (CV) y voltamperometría de pulso diferencial (DPV). Posteriormente, se mejoraron las condiciones de síntesis variando parámetros como el tiempo de polimerización y sobreoxidación. Finalmente, se realizó el reconocimiento molecular del MIP sintetizado obteniéndose un incremento del 46% de la señal analítica con respecto a la señal analítica en el microelectrodo de oro sin modificar.



Referencias

- [1]. Hasanzadeh, M.; Shadjou, N.; Omidinia, E. A Novel Electroanalytical Method for Simultaneous Detection of Two Neurotransmitter Dopamine and Serotonin in Human Serum. *J. Neurosci. Methods* **2013**, 219, 52–60.
- [2]. Cesarino, I.; Galesco, H. V; Machado, S. a S. Determination of Serotonin on Platinum Electrode Modified with Carbon Nanotubes/polypyrrole/silver Nanoparticles Nanohybrid. *Mater. Sci. Eng. C. Mater. Biol. Appl.* **2014**, 40, 49–54.

V Simposio de Química 2015

DESARROLLO DE SENSORES ELECTROQUIMICOS BASADOS EN POLIMEROS CONDUCTORES PARA LA DETECCION SELECTIVA DE NEUROTRANSMISORES

Harold Díaz, Esteban Benavides, Walter Torres, Fernando E. Larmat*

Grupo de Electroquímica, Departamento de Química, Universidad del Valle

*e-mail: fernando.larmat@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Plantillas moleculares, polímeros conductores, reconocimiento molecular, neurotransmisores.

Uno de los retos de la química analítica moderna es producir sistemas de análisis que permitan la detección y cuantificación de varias especies en forma simultánea con resolución espacial y temporal. Una de las alternativas para lograr estos objetivos es el desarrollo de multi-sensores electroquímicos en escala micro y nanométrica con características de desempeño y costo que compitan con las de instrumentos analíticos convencionales. Estos sensores se construyen sobre electrodos individuales o sobre ensamblajes bi- y tri-dimensionales (*electrode arrays*).

Para el desarrollo de sensores electroquímicos selectivos y la detección simultánea de los neurotransmisores dopamina (DA) y serotonina (5-hidroxitriptamina, 5-HT) proponemos aquí el uso de polímeros conductores y de la tecnología de impresión molecular en polímeros (*molecularly imprinted polymers*, MIPs).

En la construcción de los sensores se usa una película delgada de polipirrol como polímero conductor preparada sobre un microelectrodo de Au en presencia de los neurotransmisores (modificación electroquímica) y posterior sobreoxidación de la película. La síntesis y caracterización de los sensores se realizó por técnicas voltamétricas establecidas.

Estos neurotransmisores participan en la regulación del comportamiento de los humanos y son biomarcadores de trastornos del sistema nervioso central y de actividad cerebral. La medición simultánea de estas dos especies son de interés como herramienta de diagnóstico temprano y seguimiento de trastornos como depresión y enfermedades como Parkinson y Alzheimer.

Con el desarrollo de este proyecto se pretende continuar con la línea de investigación establecida por el Grupo de Investigación en Electroquímica en el área de los biosensores.

V Simposio de Química 2015

IMPLEMENTACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO PARA DETERMINAR ERRORES INNATOS DEL METABOLISMO (EIM) POR ESPECTROMETRÍA DE MASAS EN TÁNDEM (MS/MS)

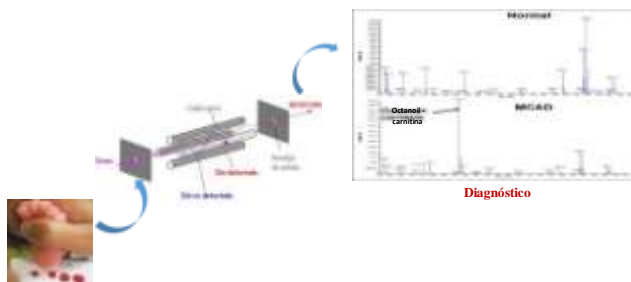
Ángela Valencia¹, Nora Céspedes¹, Carlos Echeverry¹, José Ángel Cocho², Daydi Castañeidas², Myriam Arévalo-Herrera^{1,3*}

¹Centro Internacional de Vacunas, Consorcio para la Investigación Científica Cauceseco, Kilómetro 6 vía CaliPuerto Tejada. * e-mail: marevalo@immuno.org. ²Laboratorio de Metabolopatías, Complejo Hospitalario Universitario de Santiago, Travesía de Choupana, Santiago de Compostela-España. ³Universidad del Valle, Calle 4B # 46_00, Cali, Colombia.

Palabras Claves: Errores Innatos del metabolismo (EIM), Espectrometría de masas en tándem (MS/MS), Tamizaje Neonatal Ampliado.

Resumen

Los **errores innatos del metabolismo** (EIM) son enfermedades de origen genético que se caracterizan por presentar alteraciones en la función de proteínas, enzimas o de un mecanismo de transporte celular, originando bloqueos en algunos procesos metabólicos, que pueden conducir a serias consecuencias clínicas en los neonatos, incluyendo retraso mental, incapacidad física y/o muerte [1,2]. Actualmente en Colombia y en otros países de América Latina, se utilizan métodos de análisis costosos, de baja especificidad y sensibilidad, y con una alta manipulación de la muestra para el diagnóstico de estas enfermedades metabólicas. Por tal motivo, el Centro Internacional de Vacunas con la asesoría del Laboratorio de Metabolopatías de Santiago de Compostela, implementó, estandarizó y validó un método analítico para la determinación de un total de 57 analitos en una muestra de sangre seca en papel filtro mediante una sola corrida, de los cuales 36 corresponden a derivados de acilcarnitinas con los que se pueden diagnosticar más de 30 alteraciones entre acidemias orgánicas y desórdenes de oxidación de ácidos grasos, 20 derivados de aminoácidos que hacen posible el diagnóstico de 20 aminoacidopatías y la succinilacetona que permite el diagnóstico de la tirosinemia tipo I, utilizando espectrometría de masas en tándem con ionización por electrospray (ESI-MS/MS).



REFERENCIAS: 1) Hernández DC (2010) Rev Panam Salud Publica 27: 309; 2) Chace DH, Kalas TA, Naylor EW (2003). Clinical Chemistry 49: 1797-1817.

V Simposio de Química 2015

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIDEPRESIVA, ANSIOLÍTICA Y ANTICONVULSIVANTE DE *Cyperus Hermaphroditus* Y SU MECANISMO ANTIINFLAMATORIO

FORERO G. A.C., GUTIÉRREZ V. T.M., CUERVO O. G*., CAMPO D. V.H*..

Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos y
Grupo de Investigación en Farmacología, toxicología y plantas medicinales
Departamento de Química, Universidad del Cauca
Calle 5 No. 4 - 70
carolayforero@unicauca.edu.co

Palabras Claves: LEUCOTRIENOS, CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS, MODELOS CONDUCTUALES, *Cyperus hermaphroditus*, PENTILENTETRAZOL

Resumen

La especie *Cyperus hermaphroditus* perteneciente al complejo *Cyperus refluxus* es utilizada popularmente para tratar cólicos, síncope, diabetes, convulsiones, enfermedades urinarias, cardíacas e inflamatorias. Giraldo y Gutiérrez, 2001 demostraron que el extracto acuoso de las raíces posee una actividad analgésica central no opioide, similar a la reportada para otros géneros, posiblemente mediada por la inhibición de ciclooxigenasas ó lipooxigenasas. En este trabajo se estudió el mecanismo de acción antiinflamatorio del extracto acuoso de las raíces, mediante la optimización del modelo de la disminución de los niveles de leucotrieno-B4 (LTB-4) producido por LPMN del lavado peritoneal de ratas al ser comparados con ketoprofeno (control positivo), con el objetivo de estudiar la vía de inhibición de la 5-lipooxigenasa. Los niveles de LTB-4 serán monitoreados por CLAR. Posteriormente los LTB-4 serán identificados por CG-MS, IR y RMN. Además, se evaluó la actividad ansiolítica, anticonvulsivante y antidepressiva en ratones a través del laberinto en cruz y campo abierto con agujeros, test del PTZ y el nado forzado respectivamente, obteniendo que a 2,5 mg del extracto de la planta hay poca actividad motora, frecuencia y duración de las exploraciones en ramas y zonas subterráneas, disminución en las convulsiones tónico clónicas y efecto antiinmovilidad comparable al diazepam.



Referencias

GIRALDO C. E. y GUTIERREZ J. O. Estudio de la actividad analgésica y antiinflamatoria del extracto acuoso de *Cyperus hermaphroditus*. Trabajo de grado de maestría para químico farmacéutico. Universidad del Valle, Colombia. 2001, 1-110.

V Simposio de Química 2015

ACERCAMIENTO PRELIMINAR A LA EVALUACIÓN DE RIESGO AMBIENTAL POR EXPOSICIÓN A METALES PESADOS, PLAGUICIDAS Y COMPUESTOS FARMACEUTICOS EN LA CUENCA ALTA DEL RÍO CAUCA

Martínez, J*, Páez M.

Grupo de investigación en contaminación ambiental por metales y plaguicidas

GICAMP,

Departamento de Química, Universidad del Valle

Cl. 13 #100-00, Cali, Valle del Cauca

* e-mail: Jina.martinez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Evaluación de riesgo, Metales pesados, Plaguicidas, Compuestos farmacéuticos, exposición**

Resumen

Diferentes actividades industriales, domésticas y agrícolas en el Valle del Cauca afectan la calidad del agua del río Cauca, lo que limita su uso. Dichas actividades antropogénicas hacen que residuos lleguen de una u otra forma al río. Muestras de agua y sedimentos fueron colectadas a lo largo del río en su paso por el departamento de Valle, con el objetivo de determinar metales pesados, plaguicidas y compuestos farmacéuticos. De manera preliminar se encontró la presencia de plomo en cuatro puntos de muestreo (Suarez, Juanchito, Mediacanoa, la Virginia) a una concentración promedio de en agua de río. Usando la metodología extractiva QuEChERS seguida de un análisis por GC-MS, se determinó la presencia de residuos de plaguicidas en los sedimentos colectados de algunos puntos de la cuenca alta, entre los compuestos identificados estuvieron: clorpirifos, 4,4-DDE, Endrín, 4,4-DDD. En lo que respecta a la presencia de compuestos farmacológicos, hormonas sintéticas, analgésicos, antipiréticos, agentes hipolipimiantes y antibióticos fueron encontrados con una mayor frecuencia en los puntos de muestreo; siendo el Bisfenol A, el Gemfibrozil, el naproxeno y el iopromid los compuestos de mayor prevalencia en las aguas del río.

De manera preliminar y como ejercicio indicativo, se calculó el coeficiente de peligro (HQ) de cada grupo de compuestos, encontrándose en su mayoría coeficientes bajos (menores a 1), lo que indicaría una baja probabilidad de que existan efectos adversos por la presencia de éstos compuestos en las matrices ambientales evaluadas; sin embargo, un mayor número de muestras y la realización de monitoreos en diferentes épocas del año deben ser realizados.

EPA Guidelines for Exposure Assessment **1992**, 57, 4–20.

Warren, N.; Allan, I. J.; et al., Pesticides and other micro-organic contaminants in freshwater sedimentary environments—a review. *Applied Geochemistry* **2003**, 18, 159–194

Knutsson, J. *Passive sampling for monitoring of inorganic pollutants in water*; **2013**.

Stuer-Lauridsen, F. Review of passive accumulation devices for monitoring organic micropollutants in the aquatic environment. *Environmental pollution* **2005**, 136, 503–24.

V Simposio de Química 2015

EFFECTO DE LA REFERENCIACIÓN SOBRE LA VARIANZA INTRA CLASE EN UN CONJUNTO DE PERFILES METABÓLICOS

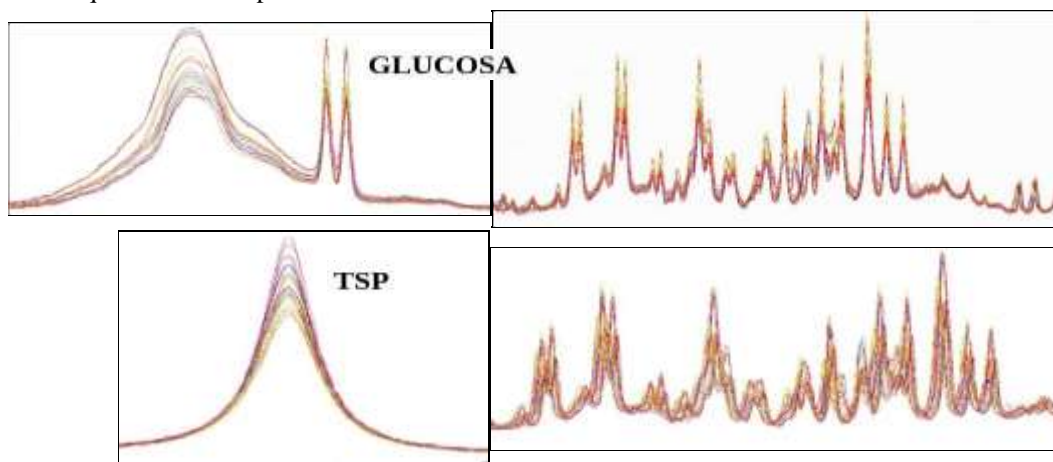
Leidy Vanessa Mena Ramírez, Julien Wist

Grupo Desarrollo y Aplicaciones en Resonancia Magnética Nuclear,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Cali, Calle 13 # 100-00, sede Meléndez
* e-mail: leidy.v.mena@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Resonancia magnética nuclear, perfiles metabólicos, glucosa, TSP, varianza.**

Resumen

El uso de compuestos de referencia en las muestras analizadas por RMN, logran asegurar la calibración de cada desplazamiento químico; estos compuestos suelen ser químicamente inertes y presentar una resonancia única a campo alto para evitar la superposición con señales asociadas a las especies de interés. En estudios de perfiles metabólicos, es de gran importancia asegurar la calidad de los espectros obtenidos, de tal manera que se genere la menor varianza en el análisis estadístico a posteriori entre un conjunto de datos. Rutinariamente, las muestras de biofluidos son analizadas con TSP, sin embargo se muestran variaciones en el corrimiento químico global de los espectros, a causa de las interacciones entre las macromoléculas, afectando el poder de referencia de estos compuestos. Con el propósito de asegurar que los desplazamientos químicos de cada una de las señales se presenten en relación a un estándar, se evaluó en un conjunto de perfiles metabólicos de muestras de suero, la referenciación interna en la resonancia del doblete anomérico de la glucosa ($\delta_H=5.233$ ppm), a causa de su intensidad y estabilidad posicional, obteniendo una menor varianza respecto a los corrimientos químicos de los perfiles.



REFERENCIA

Pearce, J. T. M.; Athersuch, T. J.; Ebbels, T. M. D.; Lindon, J. C.; Nicholson, J. K.; Keun, H. C. Robust Algorithms for Automated Chemical Shift Calibration of 1D ¹H NMR Spectra of Blood Serum. *Anal. Chem.* 2008, 80, 7158–7162.

V Simposio de Química 2015

Síntesis de cianoderivados de fenilvinileno y su aplicación como nuevas y matrices MALDI de transferencia electrónica (ET)

Ramírez-Pradilla, J. S., Blanco-Tirado, C., Combariza, M. Y. *

Grupo de Investigación en Físicoquímica Teórica y Experimental

Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander

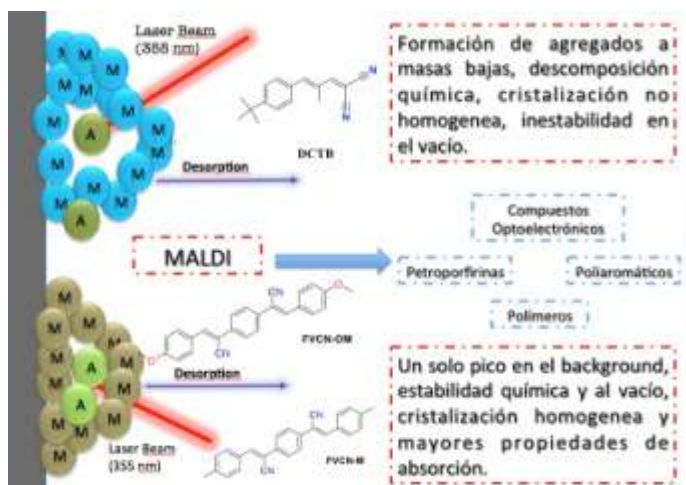
* e-mail: jsebas8905@gmail.com

Palabras Claves: **Fenilvinilenos, MALDI, Transferencia Electrónica.**

Resumen

La ionización por transferencia electrónica en MALDI es comúnmente aplicada para el análisis de polímeros, fullerenos, materiales optoelectrónicos y complejos organometálicos. Desde sus inicios se empleó DCTB como matriz comercial, sin embargo las desventajas de este compuesto como su inestabilidad al vacío, descomposición química e interferencia en el espectro de masas, no permiten la obtención de espectros adecuados y la ventana de análisis como el límite de detección se reduce.¹ Trabajos previamente reportados por nuestro grupo de investigación, demostraron que estructuras del tipo oligo *p*-fenilvinileno sustituidos se amoldan a las condiciones necesarias para ser empleadas como matrices MALDI, sin embargo sus bajos potenciales de ionización 7.00 – 7.80 eV son una limitante para la ionización de compuestos optoelectrónicos con potenciales de ionización similares.²

En este trabajo se reporta el diseño racional y síntesis de ciano *p*-fenilvinilenos sustituidos mediante reacción tipo Knoevenagel.³ La evaluación de los compuestos como matrices MALDI en comparación con la matriz estándar DCTB se llevó a cabo empleando un set de analitos modelo (Poliaromáticos, Porphirinas y Ftalocianinas, etc.) en un equipo Bruker UltraFlex MALDI-TOF/TOF equipado con un láser de estado sólido de Nd:YAG (355 nm). En todos los ensayos realizados, las matrices sintetizadas presentaron un mejor fenómeno de ionización en comparación con el DCTB.



1. Ulmer, L., Mattay, J., Torres-Garcia, H. G., & Luftmann, H. *European Journal of Mass Spectrometry*, 2000, 6, 49-52
2. CastellanosGarcia, L. J., Blanco-Tirado, C., Combariza, M. Y. Oligo *p*-phenylenevinylene derivatives as electron transfer matrices for UV-MALDI, Submitted
3. Pond, S. J.; Rumi, M.; Perry, J. W. *J. Phys. Chem. A* 2002, 106, 11470-11480
4. Jeon, S., Lee, J. P., & Kim, J. M. *J. Mater. Chem. C* 2015, 3, 2732-2736

V Simposio de Química 2015

Spatial Composition Spectroscopy (SCSY)

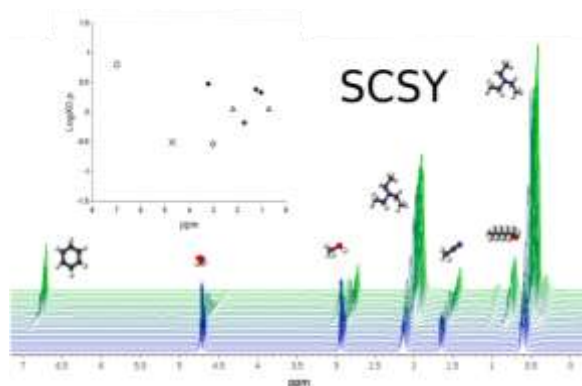
Christian Pantoja*, Alejandro Bolaños, Julien Wist

Grupo de investigación DARMN
Departamento de Química, Universidad Del Valle
Universidad del Valle sede Meléndez, Calle 13 #100-00
* e-mail: crhistian.pantoja@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Resonancia Magnética Nuclear, Difusión cooperativa, gradiente de concentración.

Resumen

En este trabajo nosotros proponemos una novedosa metodología basada en la información contenida en los gradientes de concentración generados por la mezcla controlada de un sistema binario. En este estudio una mezcla compuesta de 4 sustancias es incorporada en un sistema binario de Trietilamina (TEA) / (D_2O), posteriormente se enfría el sistema a una temperatura de 275K para inducir la mezcla de ambos solventes. La información asociada a la composición espacial del sistema es determinada a través del experimento DPGSE^[1], el cual permite medir los diferentes gradientes de concentración referentes a cada especie. Empleando el modelo *DOSE-response* se realiza el ajuste de los datos experimentales para obtener la información acerca de los centroides (LOGx0) e inclinaciones (p) para los diferentes gradientes. Se encontró que el producto (LOGX0*p) permite diferenciar las señales que corresponden a una misma molécula, permitiendo la discriminación de la especies que componen la mezcla. El resultado obtenido es finalmente comparado con la discriminación hecha a partir de los coeficientes de auto-difusión medidos a través del experimento DOSY.



Referencias

[1] W. Kozminski, Application of spatially resolved NMR spectroscopy for high resolution spectra of heterogeneous samples, Polym. J. Chem. 74 (2000) 1185-118

V Simposio de Química 2015

Determinación de materia orgánica en suelos del valle geográfico del río cauca cultivados con caña de azúcar mediante espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR)

Cristhian Javier Yarce, Jorge Enrique Castillo, Jesús Eliecer Larrahondo, Giovanni Rojas*

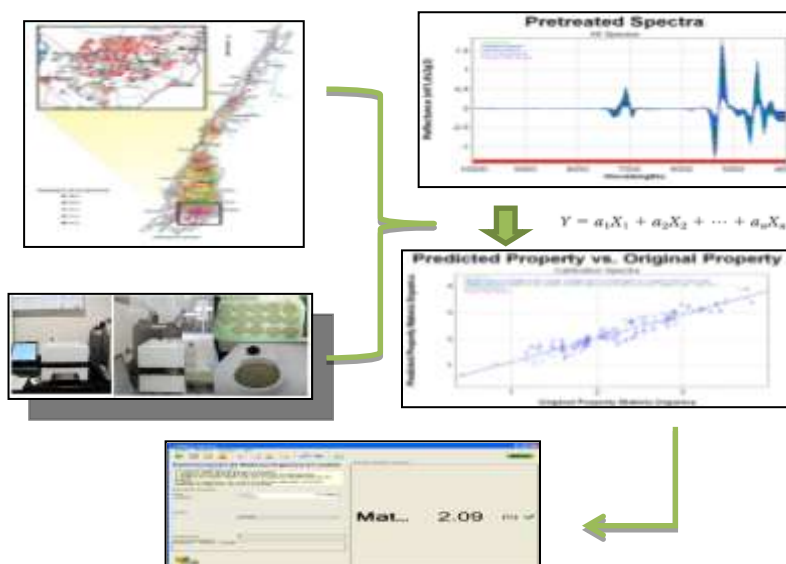
(Director del grupo)

Grupo de investigación, Natura. Facultad de Ciencias Naturales, Universidad Icesi. Dirección de la institución: Calle 18#122-135. * e-mail: cjyarce@icesi.edu.co ; grojas@icesi.edu.co

Resumen

Se construye una aplicación por espectroscopia de infrarrojo cercano (NIR) para la determinación de materia orgánica (MO) en suelos cultivados con caña de azúcar. Para el presente trabajo, fueron utilizadas 233 muestras de suelos que representaron el 98% del área cultivada con caña de azúcar. La técnica NIR fue escogida por ser no destructiva y no generar residuos ambientalmente contaminantes. El objetivo principal fue plantear una metodología alternativa para el análisis convencional o método primario de determinación de materia orgánica en suelos conocido como el método de Walkley-Black (WB). Para la calibración del NIR, se incorporó la heterogeneidad del suelo utilizando diferentes tipos del mismo, y las muestras utilizadas provienen de 24 de los 33 grupos homogéneos de suelos identificados en un estudio detallado de suelos para el cultivo de caña de azúcar en el Valle geográfico del río Cauca. Los resultados obtenidos para la aplicación NIR generada, no difieren estadísticamente del método primario, por las evidencias obtenidas en las pruebas F para comparación de varianzas y T-student para la evaluación de resultados. En la metodología NIR planteada, se obtuvieron los siguientes parámetros: rango lineal entre 0.425 - 3.802% MO, error estándar de calibración (SEC) de 0.218 %MO y error estándar de predicción (SEP) de 0.219 %MO, el coeficiente de correlación entre la predicción de la curva de calibración encontrada en el NIR y el método primario WB, fue de 0.949.

Palabras Claves: Espectroscopía de infrarrojo cercano NIR, Aplicación NIR, Materia Orgánica, Caña de azúcar.



V Simposio de Química 2015

QUÍMICA APLICADA

V Simposio de Química 2015

DESARROLLO DE ELECTRODOS SERIGRAFIADOS MODIFICADOS CON HÍBRIDOS DE Platino/Grafeno PARA LA DETECCIÓN AMPEROMÉTRICA DE H_2O_2

Marcela Ayala Toro, Oscar A. Loaiza, Julian Diel Urresta, William H. Lizcano-Valbuena*.

Laboratorio de Investigación en Catálisis Aplicada y Procesos
Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Química, Universidad del Valle.

Cll 13 # 100-00 Cali, Colombia

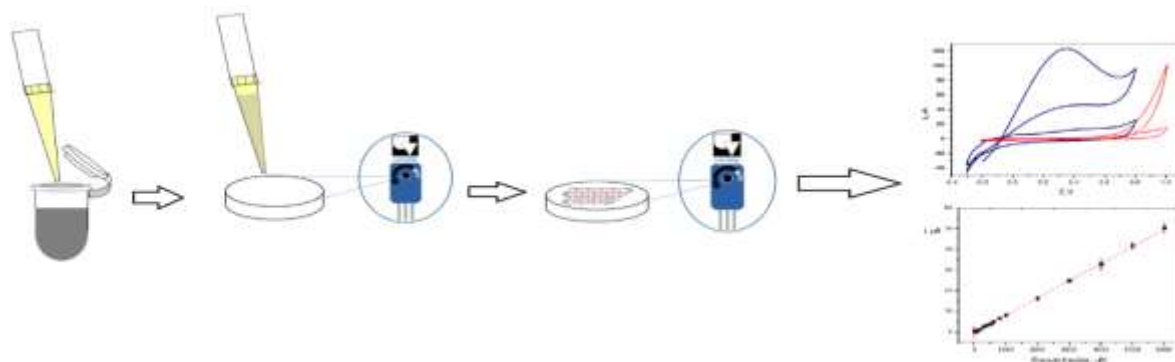
* william.lizcano@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Electrodos serigrafados, sensores amperométricos, híbridos de grafeno/Platino**

Resumen

La Nanoestructuración de electrodos serigrafados representa un modo efectivo de incrementar su sensibilidad y selectividad. En particular las nanoestructuras de carbono como el grafeno promueve las reacciones de transferencia de electrones a bajos sobrepotenciales, lo cual ha motivado el acople de estos nanomateriales con enzimas para su uso en el desarrollo de biosensores. La modificación del grafeno con nanopartículas de platino permite un mayor descenso en el sobrepotencial para la detección amperométrica de H_2O_2 , un subproducto de los biosensores enzimáticos basados en oxidasas.

En este trabajo se quiere mostrar las excelentes propiedades de los electrodos serigrafados nanoestructurados preparados depositando una gota de la solución del híbrido Pt/grafeno sobre el electrodo de trabajo. En este caso la síntesis de grafeno se ha sintetizado empleando la oxidación mediante ultrasonidos, que permite una síntesis más rápida (comparada con el método de Hummers modificado); y los híbridos de Pt/grafeno se preparan por reducción química utilizando el método del poliol. Los resultados obtenidos muestran que los electrodos serigrafados nanoestructurados dan lugar a una mayor sensibilidad a un potencial de detección más bajo (+0.3 V vs Ag/AgCl electrodo de pseudoreferencia). Las excelentes propiedades electrocatalíticas de los híbridos de Pt/grafeno combinadas con las ventajas intrínsecas de los electrodos serigrafados representan una alternativa prometedora, sencilla, reproducible y a gran escala para el desarrollo de biosensores enzimáticos basados en oxidasas.



V Simposio de Química 2015

OBTENCIÓN DE MATERIALES BASADOS EN MATRICES DE POLIURETANO Y N-(4-VINILBENCIL)-N-METIL-D-GLUCAMINA POR REDES POLIMÉRICAS INTRERPENETRANTES Y SU EVALUACIÓN EN LA RETENCIÓN DE BORO FITODISPONIBLE

Erika J. Benavides, Manuel Palencia L, Natalia Afanasjeva

Grupo de investigación en ciencias con aplicaciones tecnológicas(GICAT)
Grupo de investigación en contaminación ambiental por metales y plaguicidas
(GICAMP)

Departamento de Química, Universidad del Valle,
Calle 13#100-00

e-mail: erika.benavides@correounivalle.edu.co,
natalia.afanasjeva@correounivalle.edu.co, manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Poliuretano, boro disponible, redes poliméricas interpenetrantes

Resumen

El boro como ácido bórico (H_3BO_3), es un micronutriente que otorga beneficios a los cultivos al estar relacionado con aumentos en el rendimiento de las cosechas. Por ello, la fertilización con boro es una etapa necesaria dentro de los programas de fertilización agrícola. Así, la utilización de materiales con capacidad de carga (retención de boro) y descarga (liberación del boro retenido), tienen potenciales aplicaciones en el desarrollo de sistemas de fertilización y tratamiento de aguas de riego. En el presente proyecto, se propuso obtener un material compuesto, basado en poliuretano (PU) y N-(4-vinilbencil)-N-metil-D-glucamina (VbNMDG) mediante redes poliméricas interpenetrantes (RPIs) con aplicaciones en el desarrollo de sistemas de fertilización de boro. Para ello, diferentes matrices de PU fueron sintetizadas a partir de un isocianato (metilendifenilisocianato, MDI) y polioles variables (etilenglicol, glicerol, manitol). La capacidad de retención y liberación de boro fue evaluada mediante experimentos tipo batch efectuándose la cuantificación de boro por el método de la azometina-H. Las propiedades de retención de las RPIs aumentan con el aumento de relación $-OH/H_3BO_3$, siendo mayor a medida que la relación aumenta. Además, los resultados sugieren que las RPIs a partir de manitol poseen una mayor capacidad de retención de H_3BO_3 .

V Simposio de Química 2015

MATERIALES POLIMÉRICOS NANOESTRUCTURADOS CON POTENCIALES APLICACIONES EN EL CONTROL INMUNOHEMATOLÓGICO DURANTE EL ALMACENAMIENTO DE SANGRE

Elíizabeth Berrío, Manuel Palencia*

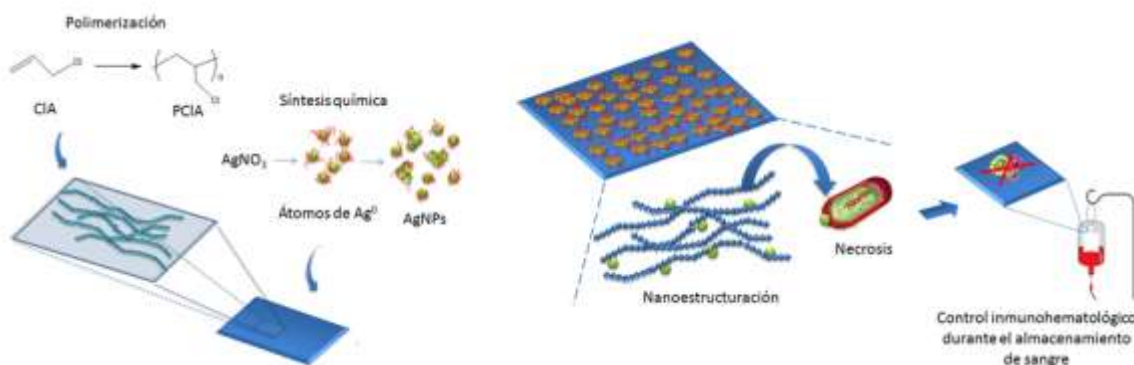
Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas (GI-CAT),
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Cl. 13 #100-00, Cali, Valle del Cauca

* e-mail: manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Nanopartículas de plata, poli(cloruro de alilo), polímeros nanoestructurados, propiedades antibacterianas.**

Resumen

Las nanopartículas de plata (AgNPs) poseen propiedades antibacterianas que han sido utilizadas como herramienta útil en el control de enfermedades infecciosas causadas por bacterias. Además, mediante la interacción de AgNPs con diversos grupos funcionales (por ej., tioles y aminas), es posible su incorporación a diferentes polímeros [1]. El objetivo del presente trabajo fue desarrollar polímeros nanoestructurados basados en poli(cloruro de alilo) (PCIA) y AgNPs para su posterior aplicación en el desarrollo de materiales de uso inmunohematológico. Aquí, se muestra la obtención del material. Para ello, AgNPs se sintetizaron mediante reducción química vía húmeda a partir de AgNO_3 y citrato de sodio, N-metil-D-glucamina (NMDG) y boro hidruro de sodio (NaBH_4) como agentes reductores y estabilizantes. También se evaluó un intercambio de ligando utilizando nanopartículas previamente reducidas tanto con citrato como con NaBH_4 , bajo una relación volumétrica 1:1 (NPs/cisteamina y NPs/cisteína, respectivamente). Los espectros de UV-vis permitieron determinar la presencia de NPs a partir de la banda del plasmón entre 400 y 500 nm. Por otro lado, se sintetizó el PCIA mediante polimerización vía radicales libres a 40 °C usando peróxido de benzoilo como iniciador activando la reacción por ultrasonido. La caracterización se realizó por FTIR y análisis elemental.



Referencias

[1]. M. Rai, A. Yadav, A. Gade, Silver nanoparticles as a new generation of antimicrobials 2009, 27(1); 76-83.

V Simposio de Química 2015

DESARROLLO Y EVALUACIÓN DE UN ALGORITMO PARA APLICACIONES COLORIMÉTRICAS MEDIANTE EL ANÁLISIS DIGITAL DE IMÁGENES

Nathalia Cajiao, Tulio Lerma, Mayra Mora, Manuel Palencia*

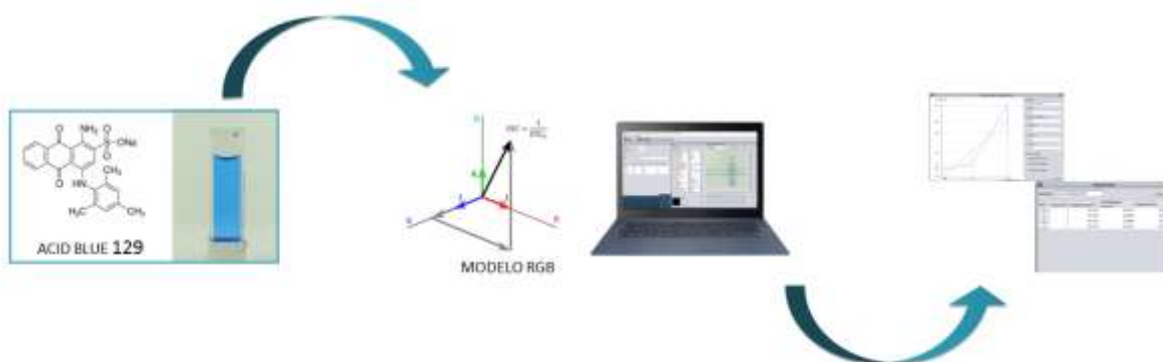
Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas (GI-CAT),
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Calle 13 #100-00

* e-mail: manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Modelo RGB, algoritmo, colorimetría, unidad de intensidad de color.**

Resumen

Actualmente existen muchas aplicaciones analíticas basadas en el color. En muchas ocasiones el costo de estos dispositivos es relativamente alto para algunos usos y en otras circunstancias su aplicación puede verse limitada. En éste contexto, la portabilidad, versatilidad de medios, acceso remoto, adaptabilidad, rapidez de adquisición de la información y bajo costo son cualidades idóneas para dispositivos colorimétricos. El objetivo de éste trabajo fue desarrollar y evaluar un algoritmo para aplicaciones colorimétricas mediante el análisis digital de imágenes. Para ello, se definió una variable denominada Unidad de Intensidad de Color (UIC), basada en el modelo RGB [1], que permite extraer y parametrizar la información del color codificada en una imagen para su posterior correlación con variables de medida (por ej., la concentración de una especie química determinada). Posteriormente, se desarrolló una aplicación informática por la empresa MINDTECH s.a.s. que se evaluó a nivel de laboratorio mediante la construcción de un dispositivo colorimétrico de prueba. Se analizó la cuantificación de ácido ascórbico, $K_3[Fe(CN)_6]$ y colorantes textiles. Se observó una adecuada correlación entre los métodos evaluados y los basados en el algoritmo propuesto. Se concluye que la UIC es un parámetro idóneo de medida de cuantificación del color mediante el análisis digital de imágenes.



[1] Firdausa M, Alwib W, Trinoveldib F. *et al.* Determination of Chromium and Iron Using Digital Image-based Colorimetry. *Procedia Environmental Sciences* 20 (2014). 298 – 304

V Simposio de Química 2015

OBTENCIÓN DE CELULOSA MICROCRISTALINA A PARTIR DE RESIDUOS LIGNOCELULÓSICOS

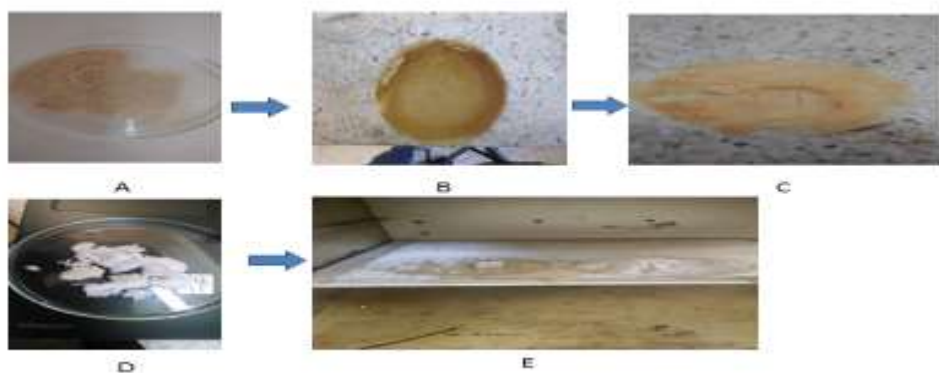
Duvan F. Castillo, Alexander Chacon, Jesus Larrahondo, Ruben Sanchez

Universidad Santiago de Cali
Calle 5 # 62-00 Barrio Pampalinda
* duvantq2010@gmail.com

Palabras Claves: Celulosa, celulosa microcristalina (MCC), Lignina, Hemicelulosa, Deslignificación, residuos lignocelulósicos

Resumen

En este trabajo, se aisló celulosa microcristalina (MCC) de diferentes residuos lignocelulósicos (bagazo de caña, cáscara de naranja y cáscara de maracuyá), utilizando un procedimiento que consistió, inicialmente, en la extracción de sustancias lipofílicas, seguidamente la deslignificación de la muestra y finalmente se realizó la hidrólisis ácida. La concentración de la celulosa microcristalina obtenida fue de 5,87 % para el bagazo de caña, 14,20 % en la cáscara de maracuyá y 5,13 % para la cáscara de naranja. Los productos obtenidos fueron caracterizados mediante análisis térmico (DSC), espectroscopia infrarroja (FTIR) y difracción de rayos X (DRX). En los espectros FTIR no se observan señales correspondientes a la lignina y hemicelulosa. La temperatura de degradación de la celulosa microcristalina de los diferentes residuos fue entre un rango de 330 y 340 ° C tomada con DSC, y en los difractogramas de rayos X de las muestras, se observaron los mismos patrones de difracción de la celulosa microcristalina comercial.



V Simposio de Química 2015

DESARROLLO DE NANOCOMPOSITOS HÍBRIDOS BASADOS EN ARCILLAS Y POLÍMEROS FUNCIONALES PARA LA CONSTRUCCIÓN DE SISTEMAS MIMÉTICOS DE LA ESTRUCTURA HUMIFICADA DEL SUELO

Tulio Lerma, Manuel Palencia*

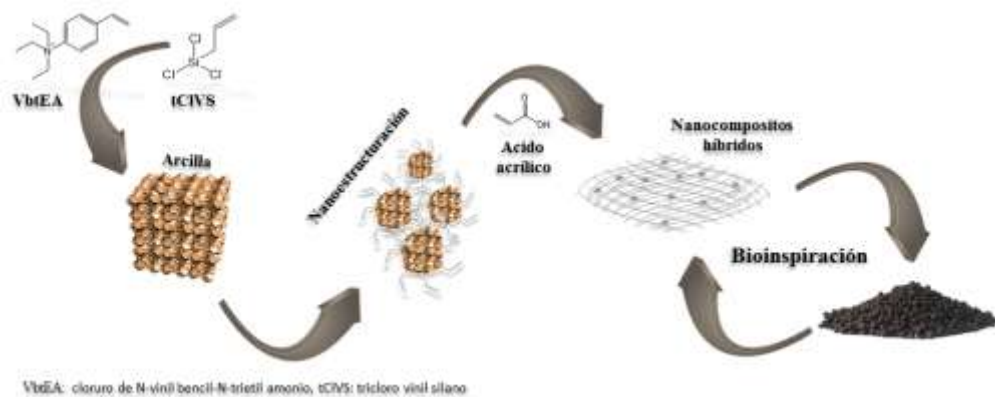
Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas (GI-CAT),
Departamento de Química, Universidad del Valle,
CI 13 N° 100-00, Cali, Colombia

* e-mail: manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Biomimesis, montmorillonita, intercalación, anclaje covalente**

Resumen

El constante deterioro del suelo como consecuencia de procesos naturales y antropogénicos ocasiona una problemática mundial debido a la disminución en la producción agrícola [1]. En la actualidad, la estrategia de biomimesis surge como una alternativa para la construcción de nuevos materiales, basados en sistemas análogos existentes en la naturaleza. De este modo, el desarrollo de nanocompositos híbridos (NCHs) emerge como una alternativa para la obtención de materiales que sirvan como base para el desarrollo de sistemas artificiales análogos al suelo. Así, el objetivo del presente trabajo fue desarrollar NCHs con capacidad de intercambio catiónico basados en arcilla y polímeros funcionales que emulen al sistema arcilla-humina-ácidos húmicos. Aquí, se reporta la construcción del sistema arcilla-humina. Para ello, se obtuvieron núcleos de arcilla químicamente activos (NAQAs) mediante dos metodologías: anclaje covalente e intercalación en solución, empujándose tricloro(vinil)silano y cloruro de N-vinilbencil-N-trietil amonio, respectivamente. Los NAQAs fueron caracterizados por análisis elemental, DRX, TGA/DSC y FT-IR. A partir de los resultados se pudo determinar la efectiva inserción de los monómeros en la matriz de las arcillas, con porcentajes mayores al 60%. Se concluyó que NAQAs pueden obtenerse mediante los procedimientos descritos como potenciales precursores de NCHs para el desarrollo de estructuras miméticas del suelo.



[1] FAO. (2011). The state of the world's land and water resources for food and agriculture: Managing systems at risk. New York: Earthscan.

V Simposio de Química 2015

HIDROGELES BIODEGRADABLES BASADOS EN POLIESTERES CATIONICOS PARA LA LIBERACIÓN CONTROLADA DE FITOHORMONAS

Mayra Mora, Manuel Palencia*

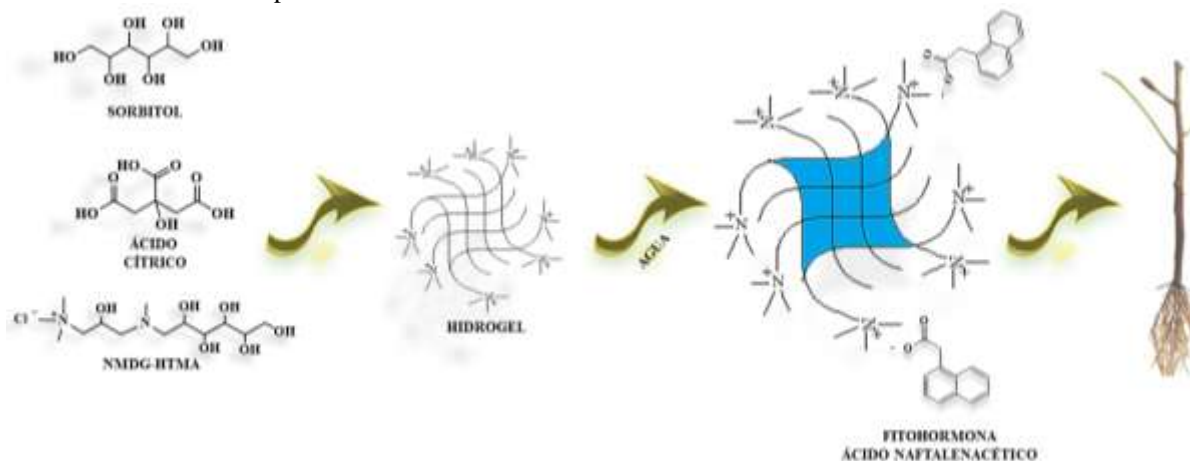
Grupo de Investigación en Ciencias con Aplicaciones Tecnológicas (GI-CAT),
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Calle 13 # 100-00

* e-mail: manuel.palencia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Hidrogel, esterificación, amonio cuaternario.**

Resumen

Un hidrogel es un material polimérico hidrofílico con capacidad de almacenar varias veces su peso en agua, esta característica hace que sean altamente atractivos en diversas aplicaciones agrícolas. Además, dependiendo de la naturaleza del polímero es posible retener sustancias disueltas en el medio de hidratación [1]. El objetivo del presente trabajo fue sintetizar un hidrogel biodegradable basado en poliésteres cationicos para la liberación controlada de fitohormonas. Inicialmente se sintetizó el monómero cloruro de 3-(N-metil-D-glucamina)-2-hidroxi-N-trimetil amonio (NMDG-HTMA) a partir de N-metil-D-glucamina y cloruro de glicidil trimetil amonio. La extracción del NMDG-HTMA del medio de reacción se llevó a cabo mediante Retención en Fase Líquida asistida por Polímeros. Posteriormente, para la obtención de los hidrogeles se hicieron reaccionar ácido cítrico, sorbitol y NMDG-HTMA en diferentes relaciones molares. Los análisis de caracterización realizados fueron FTIR-ATR y capacidad de absorción de agua. La capacidad de retención y liberación del ácido naftalen acético se evaluó mediante el método batch y su cuantificación se realizó por espectroscopia UV-vis. Se concluye que la poliesterificación de los precursores fue adecuada a cantidades equimolares de cada uno de los reactivos y el material resultante mostró una capacidad de absorción de agua alrededor de 15 veces su peso.



[1] LEE, K; MOONEY, D. Hydrogels for Tissue Engineering. *Chem Rev* **2001**: 101 (7) 1869-1879.

V Simposio de Química 2015

QUÍMICA INORGÁNICA

V Simposio de Química 2015

Investigation of the crystallization behavior of carbamazepine from ionic liquids.

A. I. Chamorro Orué¹, A. D. Bock², S. Haferkamp
Klaus Merz^{1*}

¹Chair of Inorganic Chemistry,
Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, Germany
* e-mail: Klaus.Merz@rub.de;

²solid-chem GmbH,
Universitätsstr. 136, 44799 Bochum, Germany
e-mail: info@solid-chem.com;

Keywords: polymorphism, ionic liquids, crystallization, Carbamazepine.

Abstract

The basic idea of this work is to crystallize an active pharmaceutical ingredient (API) by variation of different ionic liquids (ILs) to get new polymorphic forms. The polymorphism of an API has a significant role in terms of drug development. Polymorphs can determine the bioavailability of the drug and have significant medical implications. During the last years the application of ILs has become a promising alternative over conventional solvents. This new class of solvents is showing also suitable properties for the crystallization process of APIs. Therefore, the anticonvulsant and mood-stabilizing drug Carbamazepine (CBZ), applied primarily in the treatment of epilepsy and bipolar disorder, was recrystallized from six ionic liquids (ILs) based on 1-alkyl-3-methylimidazolium (alkyl=hexyl, pentyl) in combination with three different anions (Cl⁻, [BF₄]⁻, [PF₆]⁻). Due to the influence of ionic liquids on the formation of the intermolecular interaction of CBZ in the solution, a mixture out of the commercial crystal form III of CBZ and a new crystal form A (NF-A) was produced. This resulted by varying the ionic liquid fraction, crystallization temperature and anion-partner. The new polymorphic structure NF-A was determined and analyzed through X-ray diffraction, differential scanning calorimetry (DSC), thermogravimetric analysis (TGA) as well as IR-, Raman- and NMR-spectroscopy. In conclusion, this study shows that ILs are able to arrange molecules of CBZ under certain reaction conditions to form a new crystal structure.

V Simposio de Química 2015

EVALUACIÓN ANTIBACTERIAL UTILIZANDO COMPLEJOS INCLUSIÓN A PARTIR DE COMPLEJOS LANTÁNIDOS CON LIGANDOS CINAMATOS

Angélica María Mayor Rivera, Dorian Polo Cerón*

Laboratorio de investigación en catálisis aplicada y procesos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Calle 13 # 100-00

* e-mail: angelica.mayor.rivera@correounivalle.edu.co,
dorian.polo@correounivalle.edu.co*

Palabras Claves: **Actividad antibacterial, Complejo lantánido, Complejo de inclusión.**

Resumen

Uno de los principales problemas que se presentan en el tratamiento de enfermedades adquiridas por bacterias es la resistencia generada por estos microorganismos hacia fármacos de primera línea, lo que ha generado un desafío en la búsqueda de nuevos fármacos, con nuevos mecanismos de acción, que permitan obtener mejores resultados que con los tratamientos tradicionales. Una alternativa es la síntesis de complejos lantánidos con ligandos derivados del ácido cinámico (*p*-clorocinamato y *p*-metoxicinamato), que en su estado libre presentan propiedades antibacterianas y conllevan al aumento de las mismas con la formación de compuestos de coordinación¹. En la actualidad el uso de estos compuestos es limitado por su baja solubilidad en medios acuosos. Trabajos recientes con ciclodextrinas pueden dar respuesta a esta limitación, ya que son oligosacáridos cíclicos capaces de hospedar moléculas en su cavidad hidrofóbica generando complejos de inclusión que aumentan la solubilidad y estabilidad de ciertas moléculas. Por lo anterior se presenta la evaluación de la actividad antibacterial de los complejos de inclusión 1:3 complejo lantánido: β -ciclodextrina (Figura 1) frente a cepas bacterianas multiresistentes *gram-negativas* y *gram-positivas* empleando el método de microdilución con placas de 96 pocillos y caldo Trypticase Soja, utilizando concentraciones entre 2000 - 3.90 $\mu\text{g/mL}$.

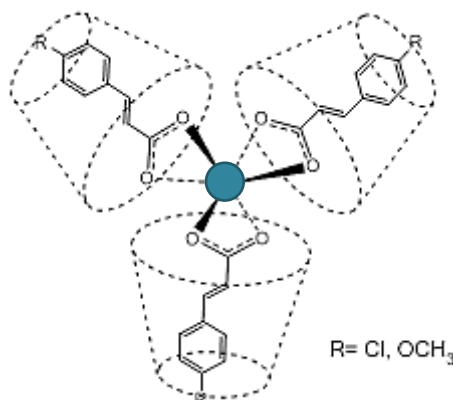


Figura 1. Esquema del complejo de inclusión.

1. Aragón, A.; Polo, D. Synthesis, characterization, thermal behavior, and antifungal activity of La(III) complexes with cinnamates and 4-methoxyphenylacetate. *Journal of Rare Earths*, 2013, 31(11), 1106-1113.

V Simposio de Química 2015

QUÍMICA ORGÁNICA

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE NUEVOS DERIVADOS PIRAZOLO QUINAZOLINAS Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES FLUORESCENTES

Acosta, P.; Quiroga, J.; Ortiz, A.; Abonia, R.; Insuasty, B.

Grupo de investigación de Compuestos Heterocíclicos (GICH),
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Calle 13 No.100-00

* e-mail: paolaandrea02233@gmail.com

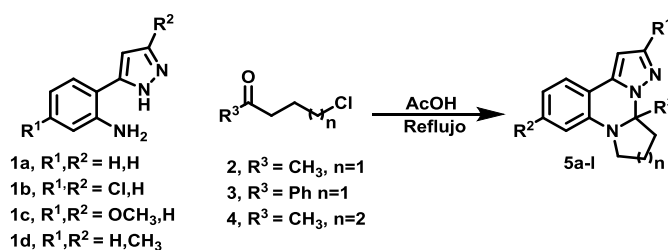
Palabras Claves: Quinazolininas, fluorescencia.

Resumen

Los compuestos heterocíclicos que contienen nitrógeno son de gran interés debido a su rol como farmacóforos. Las quinazolininas son compuestos heterocíclicos fusionados naturales y sintéticos de particular interés en química medicinal debido a las diversas actividades biológicas ya que actúan como: antiinflamatorios, antimicrobiales, antihistamínicos, antiuréticos, antimaláricos, anticonvulsivos y anticancerígenos.

Por otro lado, es bien conocido el importante número de aplicaciones que presentan los compuestos con propiedades fluorescentes tales como marcadores en bioquímica, cuantificación lipídica e interacciones inter-biomoleculares. Por esta razón contribuir a la síntesis de nuevos compuestos estables con alta fluorescencia representa un gran aporte para la modernización y aumento de eficiencia en la tecnología.

El presente trabajo se enfoca hacia la síntesis de nuevos compuestos poliheterocíclicos que incluyen el sistema quinazolinínico fusionado a otros anillos heterocíclicos (pirazol, pirrol y piridina), mediante la reacción entre pirazolilaminas y α -clorocetonas. Los derivados de las quinazolininas **5** se obtuvieron por medio de la reacción entre las pirazolilaminas **1a-d** (0.3 mmol), diferentes α -clorocetonas **2,3,4** (0.3 mmol) en ácido acético (1 mL) bajo calentamiento convencional a reflujo. Los nuevos compuestos obtenidos presentan una intensa fluorescencia en solución. Para estudiar estas interesantes propiedades luminiscentes, se midieron espectros de absorción y de emisión en diclorometano como disolvente de todos los compuestos sintetizados y se realizaron los estudios electroquímicos de los mismos.



Referencias

[1] I. Khan, A. Ibrar, N. Abbas and A. Saeed, *Eur. J. Med. Chem.*, **2014**, *76*, 193-244.

1-2 Referencias (opcional)

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS ORGANOCATALÍTICA ENANTIOSELECTIVA DE 2-CARBALCOXI-4,5-DIHIDROFURANOS A PARTIR DE 2-CLORONITROOLEFINAS Y α -CETOÉSTERES

Diana Becerra,^a Wilfried Raimondi,^a Thierry Constantieux,^a Damien Bonne,^a Jean Rodriguez^{a,*}

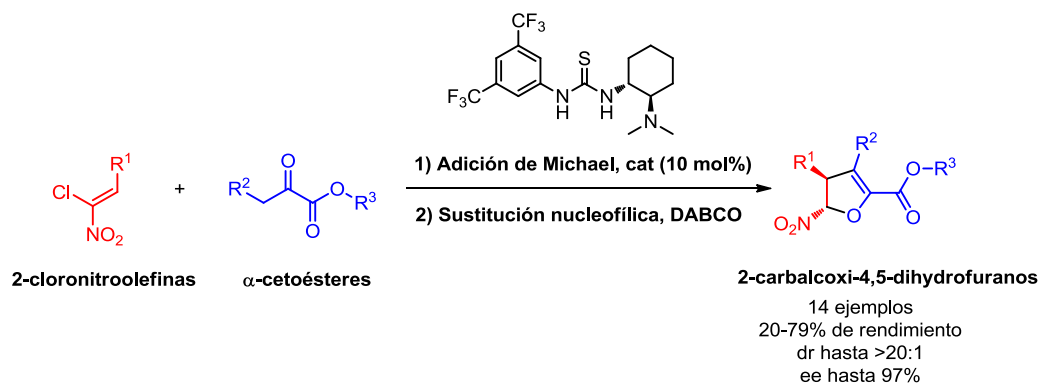
^aInstitut des Sciences Moléculaires de Marseille, Aix-Marseille Université, Centre Saint Jérôme, Service 531, 13397 Marseille cedex 20, France

*e-mail: jean.rodriguez@univ-amu.fr
dikabeco@gmail.com

Palabras Claves: Organocatálisis, 2-carbalcoxi-4,5-dihidrofuranos, síntesis one-pot, aductos de Michael

Resumen

El dihidrofurano es una subunidad estructural que se encuentra en un importante número de compuestos de origen natural, el cual ha sido usado como material de partida en la síntesis de derivados tetrahidrofuránicos que presentan una notable actividad biológica. Diversos métodos han sido usados para obtener dihidrofuranos enantioméricamente enriquecidos donde principalmente se han empleado estrategias diastereoselectivas que envuelven síntesis en múltiples etapas debido al uso de auxiliares quirales. En esta comunicación, se reporta la adición conjugada diastereo- y enantioselectiva de α -cetoésteres a 2-cloronitroolefinas de forma consecutiva one-pot empleando un catalizador bifuncional de amino tiourea (Catalizador de Takemoto) para obtener los correspondientes aductos de Michael,^[1,2] seguido de una ciclación diastereoselectiva que envuelve la sustitución nucleofílica del cloro en presencia de DABCO como base para formar los 2-carbalcoxi-4,5-dihidrofuranos con dos centros estereogénicos adyacentes, con amplia generalidad, buen rendimiento, y excelente enantio- y diastereoselectividad *trans* (Esquema 1).



Esquema 1. Reacción organocatalítica entre α -cetoésteres y 2-cloronitroolefinas.

[1] Raimondi, W.; Baslé, O.; Constantieux, T.; Bonne, D.; Rodriguez, J. *Adv. Synth. Catal.* **2012**, 354, 363.

[2] Acosta, P.; Becerra, D.; Gouedranche, S.; Quiroga, J.; Constantieux, T.; Bonne, D.; Rodriguez, J. *Synlett* **2015**, 26, 1591–1595.

V Simposio de Química 2015

FORMATION OF ADAPTIVE MACROMOLECULES BASED ON HYDRAZONE MOIETIES

Benavides, Paola A, Chaur, Manuel N*

SIMERQO,

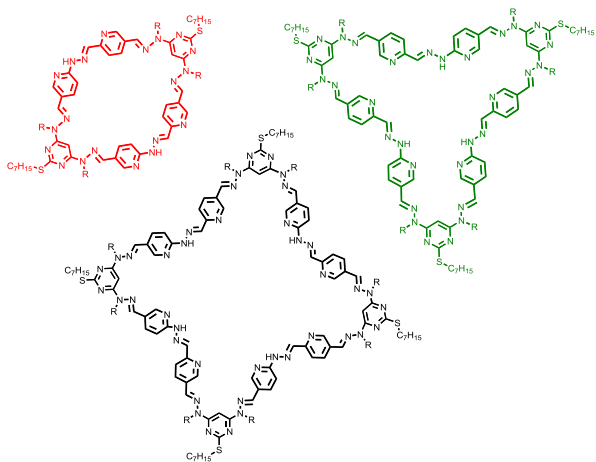
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Ciudad Universitaria Meléndez, Calle 13 # 100-00

* e-mail: manuel.chaur@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Macromolecules, Adaptive Systems, Dynamic Covalent Chemistry**

Resumen

The dynamic character of biologic systems has inspired the formation of increasingly sophisticated materials, through the integration of supramolecular interactions and dynamic covalent bonds in their constitution. In that way, these new materials exhibit an adaptive behavior, that means, have the capability of tuning their constitutional, conformational or structural nature in response to an external stimuli. Nowadays the integration of these concepts in the development of new macromolecules, has allowed the formation of polymeric entities whose monomeric components are linked through reversible connections and have therefore the capacity to modify their constitution by exchange and reshuffling of their components.¹



In order to achieve the development of these materials, our research group has focused on the synthesis of polypyrroline macromolecules based on hydrazone moieties, which allow to take advantage of supramolecular interactions and dynamic covalent bonds. In a first approach we have achieved the creation of new conjugated macrocyclic structures showing a dynamic behavior in response to the presence of metal ions and changes in the solvent. Likewise, variations in the constitution of the monomers show influences in the solubility of the material, and in the quantity of macrocycles formed in solution.

1. Lehn, J.-M. ; *Prog. Polym. Sci.* **2005**, *30*, 814.

V Simposio de Química 2015

DISEÑO Y SÍNTESIS DE DERIVADOS BODIPY PARA APLICACIONES FOTOVOLTAICAS

Andrea Cabrera-Espinoza, Alejandro Ortiz, Braulio Insuasty*

Grupo de investigación de Compuesto Heterocíclicos (GICH),
Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle
A.A. 25360. Cali - Colombia

* e-mail: andrea.cabrera@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **BODIPY**, **Fullereno**, **Transferencia electrónica**, **Fotofísica**.

Resumen

La nanociencia y la nanotecnología representan una nueva visión de la ciencia que involucra el estudio de la materia a escala nanométrica y su posterior aplicación en el diseño de dispositivos a escala molecular. Entre sus diversas aplicaciones, uno de los aspectos de mayor interés científico, ha sido el desarrollo de materiales orgánicos para su uso en electrónica molecular y especialmente, en sistemas que funcionen a base de procesos de transferencia electrónica fotoinducida (PET). Dichos materiales reciben una atención considerable debido a su participación en el desarrollo de nuevos semiconductores, emisores de luz, materiales para el transporte de carga, fotoconductores, dispositivos optoelectrónicos, sensores, sistemas de conversión de luz en energía eléctrica y otros materiales nanoestructurados. En este sentido, uno de los grandes retos a los que se enfrenta la química orgánica moderna es la búsqueda de moléculas que presenten eficiencias de transporte electrónico, similares a las de procesos naturales tales como la fotosíntesis. En el cual, la luz solar es recogida por moléculas antena, y la energía de excitación se canaliza hacia el centro de reacción, en el que se produce la transferencia de electrones para generar gradiente de potencial electroquímico capaz de conducir las reacciones químicas. En consecuencia, ha habido un considerable interés en imitar este proceso mediante el empleo de sistemas fotosintéticos artificiales. En el diseño de estas arquitecturas moleculares los dipirrometanos de boro (BODIPY) son frecuentemente utilizados como antenas captadoras de luz y entidades de transferencia electrónica, hacia unidades aceptores de electrones tales como los fullerenos. El sistema molecular BODIPY es de particular interés debido a sus excelentes propiedades optoelectrónicas y junto a las propiedades electroquímicas y electrofísicas únicas de los fullerenos, constituyen un conjunto de funciones interesantes por explorar. Así que en este trabajo de investigación se plantea realizar la síntesis del derivado fullerénico **I** (Figura 1) y el estudio de sus propiedades optoelectrónicas.

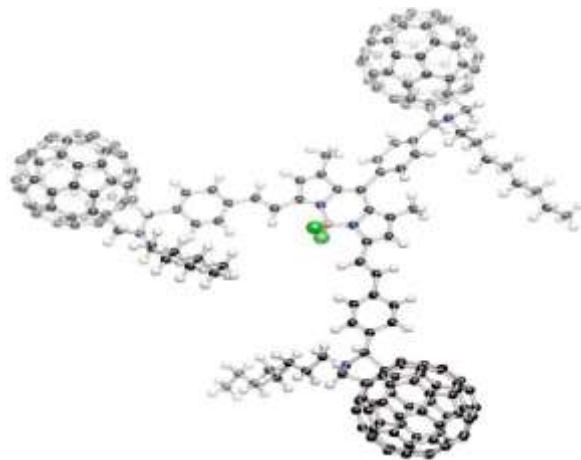


Figura 1. Estructura molecular del derivado BODIPY I

V Simposio de Química 2015

OBTENCIÓN DE PAPEL PIEDRA A PARTIR DE CARBONATO DE CALCIO Y QUITOSANO

Maria Alejandra Castellanos, Giovanni Rojas*
Grupo de Investigación NATURA
Departamento de Química, Universidad Icesi,
Calle 18 No. 122-135 Pance, Cali.
* e-mail: grojas@icesi.edu.co

Palabras Claves: **Papel piedra, biopolímero, plastificante, Quitosano, química verde.**

Resumen

Actualmente, existen numerosos problemas ambientales, debido a la deforestación y contaminación que supone la producción en masa de materiales derivados del papel. Por ello resulta de suma importancia encontrar medios alternativos para obtener papel, el cual es muy necesario para las actividades humanas. Este proyecto consiste en la preparación de papel piedra a partir del biopolímero quitosano y carbonato de calcio, empleando plastificantes no tóxicos para darle propiedades más adecuadas al material. Se busca que el papel sintetizado tenga propiedades muy similares a las del papel convencional, y que además posea algunas adicionales, como una mayor resistencia e impermeabilidad al agua; lo cual lo haría ideal para salidas de campo, excursiones, o situaciones similares. Para ello, se realizó un diseño de experimentos, buscando encontrar el plastificante adecuado (citrato de sodio, citrato de trietilo, citrato de tributilo y citrato de tributilo acetilado), y las cantidades de reactivos (quitosano, carbonato de calcio y el plastificante) y condiciones óptimas para obtener un material con las propiedades deseadas. Idealmente, el carbonato de calcio será extraído de conchas de piangua, una especie del pacífico colombiano, y afectada debido a su consumo indiscriminado; su empleo implicará un uso más responsable que no afecte la población total a largo plazo.

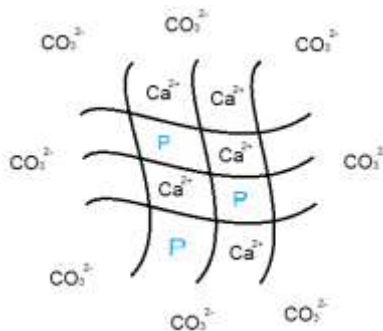


Imagen representativa: **Red de Quitosano, carbonato de calcio y plastificante.**

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE PIRIDO[2,3-*d*]PIRIMIDINONAS VIA α -OXO-CETENAS

Juan Castillo,^{1,2} Jairo Quiroga,³ Rodrigo Abonia,³ Jean Rodriguez,^{1,*} Yoann Coquerel^{1,*}

¹Institut des Sciences Moléculaires de Marseille, Aix-Marseille Université, 13397 Marseille, France

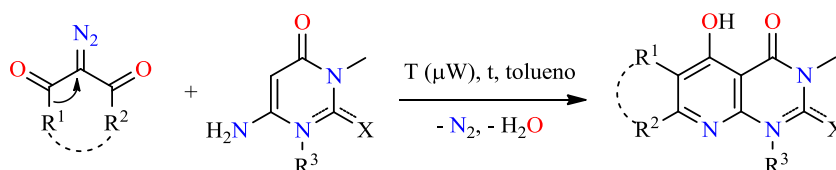
²Grupo de Investigación en Compuestos Bio-Orgánicos, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 N° 18A-12, Bogotá, Colombia

³Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Universidad del Valle, A.A. 25360 Cali, Colombia
e-mail: jc.castillom@uniandes.edu.co

Palabras Claves: Diazocompuestos, microondas, pirido[2,3-*d*]pirimidinonas, rearreglo de Wolff

Resumen

Un importante foco de la síntesis orgánica contemporánea es la economía atómica y las transformaciones (reacciones domino, cascada, consecutiva y one-pot) que permiten generar múltiples enlaces, complejidad molecular y diversidad funcional en una sola operación química. Estas transformaciones se realizan con sustratos polifuncionalizados en donde cada grupo funcional reacciona selectivamente en un orden definido para generar un solo producto. En este contexto, las α -oxo cetenas son moléculas altamente reactivas y su uso en síntesis envuelve la generación *in situ*, seguido por un atrapamiento directo con especies presentes en la mezcla de reacción. Continuando con nuestro programa de investigación sobre la reactividad de las α -oxo-cetenas, y dada la importancia del núcleo pirido[2,3-*d*]pirimidina en la química medicinal, nos planteamos el uso de los derivados de 6-aminopirimidina como posibles 1,3-*C,N*-bis-nucleófilos con α -oxo-cetenas como una ruta sintética alternativa para la obtención de estos heterociclos (Esquema 1).^[1,2] En el presente trabajo se reporta la síntesis de pirido[2,3-*d*]pirimidinonas altamente sustituidas y funcionalizadas a través de una reacción domino asistida por microondas entre compuestos 2-diazo-1,3-dicarbonílicos con derivados de 6-aminouracilo siguiendo la secuencia domino: rearreglo de Wolff / acilación de Friedel-Crafts / iminación intramolecular.



Esquema 1. Síntesis de pirido[2,3-*d*]pirimidinonas desde α -oxo cetenas y derivados de 6-aminouracilo.

[1] Castillo, J-C.; Presset, M.; Abonia, R.; Coquerel, Y.; Rodriguez, J. *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, *12*, 2338–2345. [2] Galvez, J.; Castillo, J-C.; Quiroga, J.; Abonia, R.; Coquerel, Y.; Rodriguez, J. *Org. Lett.* **2014**, *16*, 4126–4129.

V Simposio de Química 2015

SINTESIS DE COMPUESTOS ELECTROACTIVOS BASADAS EN PIRIDINA COMO UNIDAD DADORA Y FLUORENO COMO ESPACIADOR ELECTRONICO PARA ESTUDIOS ELECTRONICOS

J.Castro¹, Alejandro Ortiz, Braulio Insuasty^{1*}

¹Grupo de investigación de Compuestos Heterocíclicos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360 Cali, Colombia
* e-mail: braulio.insuasty@gmail.com

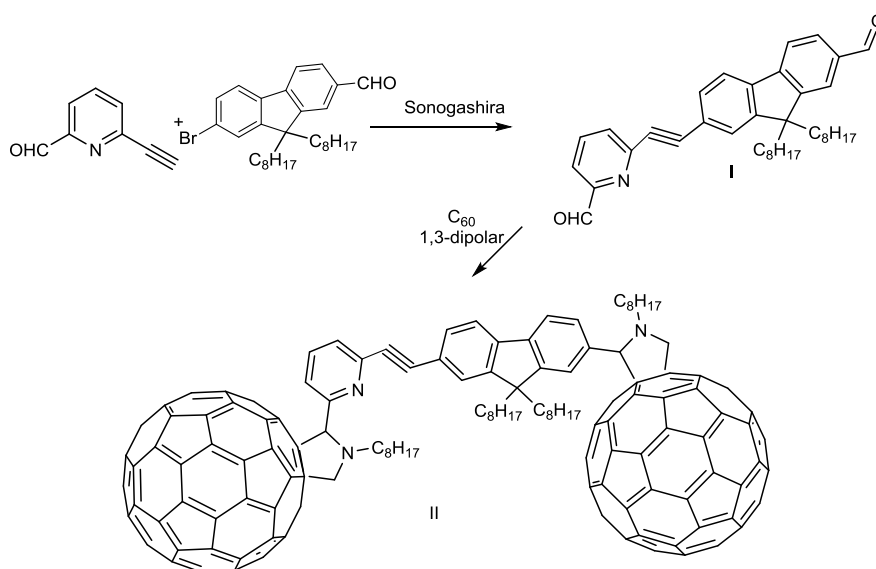
Palabras Claves: Piridina, Fluoreno, materiales orgánicos, transporte de carga.

Resumen

Durante los últimos 20 años se han desarrollado materiales orgánicos del tipo Dador-Aceptor con amplio interés en sus propiedades físicas no convencionales, en paralelo con las nuevas tendencias en química orgánica, se pretende obtener nuevas moléculas que tengan la capacidad de transportar carga eléctrica intramolecularmente y de esta manera poder estudiar su posible aplicación en el amplio campo de la química de materiales donde se destacan los transistores de efecto de campo orgánico (OFETs), diodos emisores de luz orgánica (OLED) y celdas solares fotovoltaicas.

Inicialmente se realizó la síntesis de diversos compuestos electroactivos usando fragmentos derivados de la piridina como fuente donora de electrones unido covalentemente a una unidad de fluoreno como espaciador π -conjugado. La ruta sintética final consiste en la unión de fragmentos aceptores de electrones (fullereno C_{60}) a la estructura mencionada anteriormente a través de reacciones del tipo 1,3-dipolar con *N*-octilglicina.

Las moléculas obtenidas se caracterizaron por medio de diferentes técnicas espectroscópicas como: TF-IR, RMN¹H, RMN-¹³C, también por espectrometría de masas.



V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVAS PIRAZOLINAS DERIVADAS DEL 5-MORFOLINO-1-ARILPIRAZOL CON POSIBLE ACTIVIDAD BIOLÓGICA

Viviana Cuartas*, Braulio Insuasty, Jairo Quiroga, Rodrigo Abonia

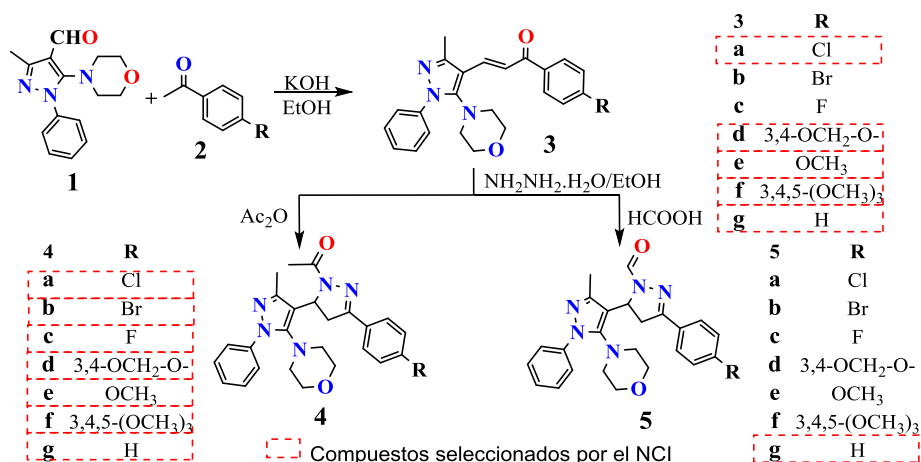
Grupo de Investigación de Compuesto Heterocíclicos
Departamento de Química, Universidad del Valle
Calle 13#100-00

*viviana.cuartas@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **5-mofolino-1-arilpirazol, chalconas, 2-pirazolinas, actividad biológica.**

Resumen

Los sistemas pirazolínicos son de gran interés porque presentan importantes aplicaciones biológicas. En este trabajo se describe las síntesis de nuevas pirazolinas *N*-acetiladas y *N*-formiladas, obtenidas a partir de la ciclocondensación de hidracina con chalconas pirazólicas derivadas del 5-morfolino-4-formilpirazol y diferentes acetofenonas aromática por medio de una condensación tipo Claisen-Schmidt. Además se logró implementar una metodología a través de radiación de microondas para la síntesis del 5-morfolino-4-formilpirazol. Los compuestos sintetizados fueron evaluados en la Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas de la Universidad del Rosario en Argentina contra especies fúngicas, sin embargo los compuestos presentaron CMI >250µg/mL por lo que los compuestos son poco activos frente al panel de hongos evaluado. Actualmente, los compuestos sintetizados se ofrecieron al National Cancer Institute de los Estados Unidos para realizar estudios de actividad antitumoral, de los cuales han sido seleccionados 13 compuestos de los 21 compuestos sometidos, para realizar ensayos a una dosis 1.0µM frente a 60 líneas celulares cancerígenas.



V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE POLIETILENO CON RAMIFICACIONES MUY LARGAS Y POCO FRECUENTES

Lina Marcela Delgado¹, Kenneth Wagener², Giovanni Rojas^{1,2}

¹Departamento de Química, Universidad Icesi

Calle 18 No. 122-135 Pance, Cali – Colombia

* e-mail: grojas@icesi.edu.co

Butler Polymer Research Laboratory

University of Florida, Department of Chemistry

Gainesville, FL 32611-7200, USA

Palabras Claves: **modelamiento; polímero; polietileno; metátesis; síntesis; catalizador**

Resumen

Este proyecto se realizó por medio de una polimerización *vía* “acyclic diene metathesis polymerization (ADMET)” en presencia del catalizador de Grubbs de primera generación con el fin de sintetizar polietileno (PE) lineal de baja densidad (LLDPE), el cual a diferencia del LLDPE comercial presenta ramificaciones en lugares específicos de la cadena carbonada. De este proyecto se obtuvo tres polímeros, dos de ellos con ramificaciones de 17 y 21 carbonos las cuales aparecen cada 21 carbonos, mientras el tercero de ellos se sintetizó con una ramificación de 21 carbonos la cual aparece cada 39 carbonos. Lo anterior se llevó a cabo partiendo de un bromo alqueno y un nitrilo primario. La longitud de la cadena carbonada del bromo alqueno se puede modificar para obtener diferente espaciadores, de igual forma la longitud de la cadena unida al grupo ciano variará de acuerdo al tipo de ramificación que se desee. El nitrilo se obtuvo mediante la sustitución nucleofílica del bromoalcano correspondiente en presencia de cianuro de potasio (KCN) en dimetilformamida (DMF) con rendimientos del 60%. La alquenilación del nitrilo se realiza dos veces consecutivas seguido de la eliminación reductiva de cianuro, obteniendo de esta forma en rendimientos cuantitativos el monómero α,ω -olefina ramificada. La polimerización *vía* ADMET utilizando el catalizador de Grubbs de primera generación procedió con un rendimiento del 90% y su consecuente formación de macrociclos.

Referencias:

1. Kageyama. Keisuke, Tamazawa. Jun-ichi, Aida. Takuzo. Extrusion Polymerization: Catalyzed Synthesis of Crystalline Linear Polyethylene Nanofibers Within a Mesoporous Silica, 1999.
2. Rojas. Giovanni, Berda. Erik B, Wagener. Kenneth B. Precision polyolefin structure: Modeling polyethylene containing alkyl branches, 2008.

V Simposio de Química 2015

OBTENCIÓN DE PRODUCTOS DERIVADOS DEL SECTOR AZUCARERO CON ALTO VALOR AGREGADO

Diego Enriquez, Ferley Orozco, Giovanni Rojas*,
Grupo de Investigación NATURA
Departamento de Química, Universidad Icesi,
Calle 18 No. 122-135 Pance, Cali.
* e-mail: grojas@icesi.edu.co

Palabras Claves: Sucro-ésteres, Trans-esterificación, Biocatálisis, Surfactante no-iónico, RMN-¹H

Resumen

Durante varios siglos los carbohidratos han suscitado gran interés en distintos campos de la investigación científica, gracias a su elevado valor como elementos de nutrición y a su vital participación en diversos procesos metabólicos. Una de las aplicaciones más prometedoras de la molécula de sacarosa ha sido su uso en la obtención de ésteres de sacarosa de ácidos grasos, compuestos que han demostrado tener efectividad en una amplia gama de procesos que van desde su uso como surfactantes no-iónicos, bio-insecticidas y aditivos alimenticios hasta su utilización como componentes principales en productos del cuidado personal y en fármacos para el tratamiento de diversas enfermedades. El propósito principal de esta investigación, consistió en la síntesis controlada de ésteres de sacarosa, mediante la exploración de diferentes metodologías sintéticas, con el ánimo de lograr desarrollar la estequiometría y condiciones óptimas de reacción para la producción de mono, di y/o poli-ésteres de sacarosa. Así, se realizó la funcionalización del azúcar comercial con derivados de ácidos grasos (ésteres metílicos, vinílicos y cloruros de ácido), mediante reacciones de trans-esterificación empleando catalizadores químicos (sales básicas de sodio y potasio) y métodos bioquímicos con catalizadores enzimáticos (lipasas). Los ésteres sintetizados fueron identificados y caracterizados mediante espectrometría de masas, espectroscopía IR y RMN-¹H.

V Simposio de Química 2015

DISEÑO Y SÍNTESIS DE NUEVAS QUINOLIN *BIS*-CHALCONAS NO SIMÉTRICAS CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIBACTERIAL Y ANTITUMORAL

S. García-López*, D. Insuasty, R. Abonia-Gonzalez, B. Insuasty, J. Quiroga

Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A 25360 Cali, Colombia

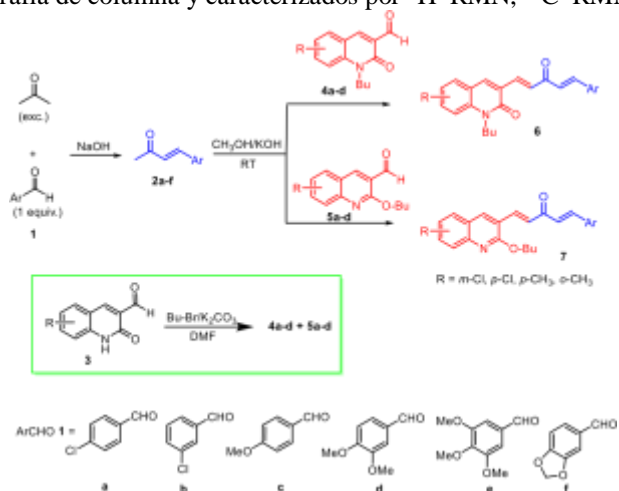
* stephanie.garcia@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Actividad Antibacterial, Actividad Anticancerígena, Quinolin- *Bis*-Chalconas, Compuestos Carbonílicos α, β -Insaturados.

Resumen

La principal causa de aparición de cáncer, se debe a alteraciones que son el resultado de la interacción entre los factores genéticos del paciente y tres categorías de agentes externos: carcinógenos físicos, carcinógenos químicos y carcinógenos biológicos. Aunque existen diversas modalidades terapéuticas para el tratamiento del cáncer, como la cirugía, la radioterapia o la quimioterapia, el objetivo es curar esta enfermedad, prolongar y mejorar la calidad de vida del paciente. Teniendo en cuenta el alto potencial antitumoral que encierran los sistemas quinolínicos, así como las chalconas, se planteó una ruta sintética la cual se enfoca hacia la preparación de nuevos compuestos que incluyen ambos sistemas.

Se sintetizaron las monobenziliden-acetonas **2a-f** a partir de la reacción de acetona (exceso) con un equivalente de los aldehídos **1a-f** en medio alcalino. Por otro lado se prepararon los *N*-/*O*-alquil derivados de los quinilinaldehídos **4a-d** y **5a-d** a partir de la alquilación de las formilquinolonas **3**. Finalmente, la condensación aldólica en medio alcalino entre los mono-derivados **2a-f** y los quinolin-aldehídos **4a-d** y **5a-d** condujo a la formación de las quinolin *bis*-chalconas esperadas **6** y **7** respectivamente. Los productos fueron purificados por cromatografía de columna y caracterizados por ^1H RMN, ^{13}C RMN y DEPT 135.



V Simposio de Química 2015

CONSTRUCCIÓN DE NOVEDOSOS SISTEMAS HETEROPOLICÍCLICOS FUSIONADOS DERIVADOS DEL INDOL, INVOLUCRANDO CICLACIONES EN CASCADA VÍA RADICALES ARILO E IMINILO

Andrés Camilo García, Rodrigo Abonia Gonzalez, Luz Marina Jaramillo

Grupo de investigación en Síntesis y Mecanismos de Reacción en Química Orgánica (SIMERQO)

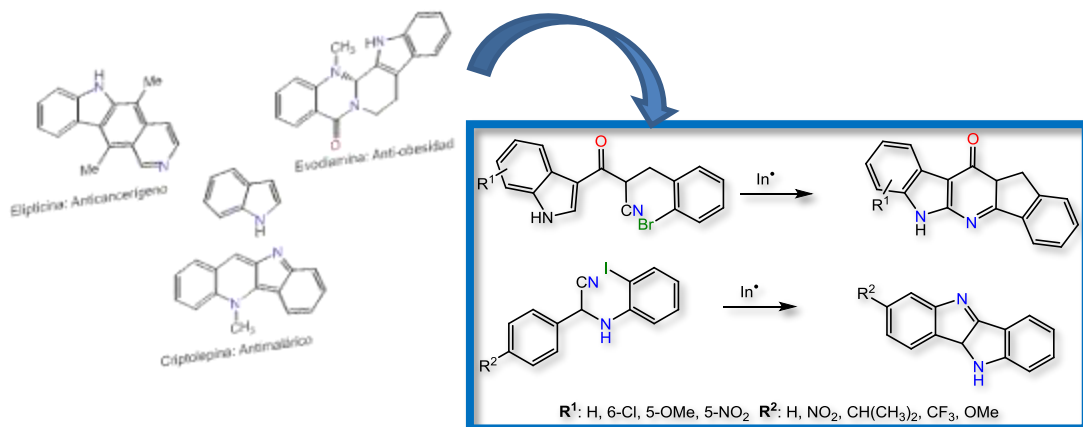
Departamento de Química, Universidad del Valle
Apartado 25360, Cali, Colombia

*garcia.andres@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Indol, Radicales iminilo, ciclación en secuencia**

Resumen

En el contexto en el que nos encontramos los seres humanos, en la búsqueda de nuevos fármacos eficientes en el tratamiento de diferentes tipos de enfermedades, numerosos compuestos orgánicos con aplicabilidad biológica han sido obtenidos usando diferentes métodos. Sobresalen entre estos compuestos algunos derivados del indol (Elipticina, Evodiamina, Criptolepina), con elevada importancia biomédica. Para la obtención de estos compuestos y sus análogos a nivel de laboratorio, metodologías sintéticas que involucran esencialmente intermediarios iónicos¹ han sido desarrolladas; en adición a estas, se encuentran aquellas que involucran radicales libres como intermediarios². Teniendo en cuenta lo anterior y la amplia experiencia de nuestro grupo de investigación se plantea la síntesis de compuestos heteropolicíclicos fusionados involucrando algunas etapas con radicales libres. Este trabajo presenta los resultados preliminares de la construcción de los nuevos sistemas derivados del indol con la obtención de los ciano-precursores clave y algunos ensayos de ciclación en cascada vía radicales arilo e iminilo



Referencias

- (1) Wang, L.; Lu, W.; Odawara, T. Improved Synthesis and Reaction of 11-Chloroneocryptolepines, Strategic Scaffold for Antimalaria Agent, and Their 6-Methyl Congener from Indole-3-Carboxylate. *J. Heterocycl. Chem.* **2014**, *51*, 1106–1114
- (2) Beaume, A.; Courillon, C.; Derat, E.; Malacria, M. Unprecedented Aromatic Homolytic Substitutions and Cyclization of Amide-Iminyl Radicals: Experimental and Theoretical Study. *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 1238–1252

V Simposio de Química 2015

Ciclación en Secuencia de Bencidriloximas *vía* Radicales Arilo y Alquiloxiaminilo para la Síntesis de N-Alcoxiaminas Tricíclicas Fusionadas

Alejandro Guerrero C., Luz Marina Jaramillo-Gómez*

Síntesis y Mecanismos de Reacción en Química Orgánica (SIMERQO)

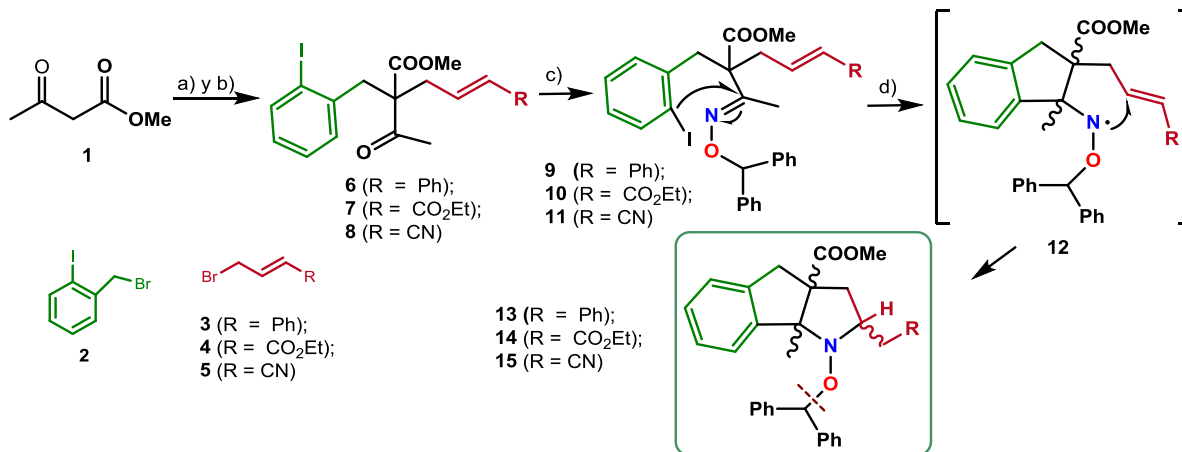
Departamento de Química, Universidad de Valle

alejandro.guerrero.c@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: N-Alcoxiaminas, Ciclación en Secuencia, Radicales Alquiloxiaminilo

Resumen

Se reporta en esta ponencia el acercamiento a la síntesis de sistemas tricíclicos, tipo indeno fusionado a un núcleo pirrolidínico, partiendo de éteres de oxima funcionalizados con sustituyente *o*-yodofenilo, y un apéndice olefínico (cinamilo, cronotonitrilo ó crotoniletilo). Los heteropolicíclicos en este estudio, son N-alcoxiaminas de las cuales se pretende efectuar un rompimiento homolítico del enlace C-ON para generar radicales aminoxilo (nitroxidos), los cuales presentan gran interés en polimerización viviente controlada [1], además de tener numerosas aplicaciones biológicas [2]. Así, los éteres de oxima precursores **9**, **10** y **11**, se prepararán a través de tres etapas sintéticas iniciando con la alquilación sucesiva del acetoacetato de metilo (**1**) para generar los β -oxoésteres **6**, **7**, **8** correspondientes. A su vez, el grupo carbonilo se transformará en la función imino por tratamiento con *O*-bencidrilhidroxilamina. Finalmente, los éteres de oxima **9**, **10** y **11** se transformarán *vía* radicales en las N-alcoxiaminas **13**, **14** y **15**, a través de dos cierres en secuencia 5-*exo* (en un vaso de reacción) con participación de radicales arilo y alquiloxiaminilo (**12**).



Cond. exp.: (a) **2** / t-BuOK/THF t. a. (b) **3**, **4** **6** **5** / t-BuOK/THF t. a. (c) HCl.H₂N-OCH(Ph)₂/Piridina/MeOH (d) *n*-Bu₃SnH/ AIBN/ Ciclohexano, 80°C ó *n*-Bu₃SnH/Et₃B/Ciclohexano, 25°C.

1. Nicolas, J.; Guillaneuf, Y.; Lefay, C.; Bertin, D.; Gimes, D.; Charleux, B. *Prog. Polym. Sci.*, **2013**, 38, 63– 235.
2. Audran, G., Brémond, P.; Franconi, J-M.; Marque, R.A.; Massot, P.; Mellet, P.; Parzy, E. Thiaudiere, E. *Org. Biomol. Chem.*, **2014**, 12, 719-723.

V Simposio de Química 2015

Dealkoxycarbonylations over a Silica Gel bed and Microwave irradiation of mono-, di-substituted β -Keto esters and α -Cyano esters

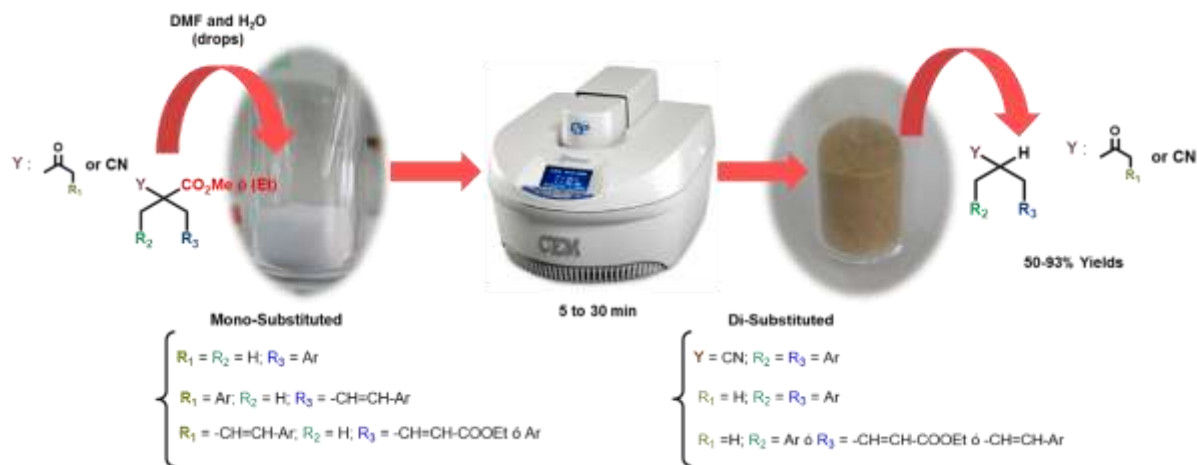
Alejandro Guerrero C., Diana M. Soto, Luz Marina Jaramillo-Gómez*

Síntesis y Mecanismos de reacción en Química Orgánica SIMERQO
Departamento de Química, Universidad de Valle
Calle 13 100-0, Ciudad Universitaria Meléndez
alejandro.guerrero.c@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Dealkoxycarbonilation, Microwave irradiation, β -ketoesters, α -cyanoesters**

Abstract

Malonate esters, β -keto esters and α -cyano esters are of a huge importance in organic synthesis, due to they can be transformed into diverse precursors for synthetic applications. Particularly, the dealkoxycarbonylations of these substrates have been employed since 70th decade, and the first examples were published by Krapcho¹ using inorganic salts (e. g. NaCN, NaCl and LiCl), water and dipolar aprotic solvents (DMSO and DMF). The above methodology synthetic has been slightly modified, in some examples have applied microwave irradiation to reduce long reaction times and high temperatures, nevertheless certain reaction conditions were not effective for di-substituted ketoesters and cyano esters². In this work, we report the dealkoxycarbonylation of mono- and di-alkylated acetoacetic acid methyl ester and cyanoacetic acid methyl ester with lithium chloride by adsorption over silica gel, some drops of DMF and water and microwave irradiation assisted, with yields between 50 % and 93 %, and reaction times minimal of 5 minutes and maximum 30 minutes.



References

1. a) Krapcho, A. P, *Synthesis*, **1982**, *10*, 805-822. b) Krapcho, A. P, *Synthesis*, **1982**, *11*, 893-914. c) Krapcho, A. P.; Ciganek, E., In *Organic Reactions*, Scott E. D. Ed.; Wiley, **2013**, *81*, 4-538.
2. a) Perreux L.; Loupy, A. *Tetrahedron*, **2001**, *57*, 9199-922. b) Curran D. P. ; Zhang, Q. *Adv. Synth. Catal.* **2003**, *345*, 329-332. c) Murphree S. S.; Manson J. D.; *Synlett*, **2013**, *24*, 1391-1394.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE ISOBENZOFURANONAS Y SU TRANSFORMACIÓN EN NUEVOS SISTEMAS HETEROCÍCLICOS POR UN PROCESO DE APERTURA/CIERRE INTRAMOLECULAR DE ANILLO

Luisa Gutiérrez-Tabares, Rodrigo Abonia, Jairo Quiroga, Braulio Insuasty*

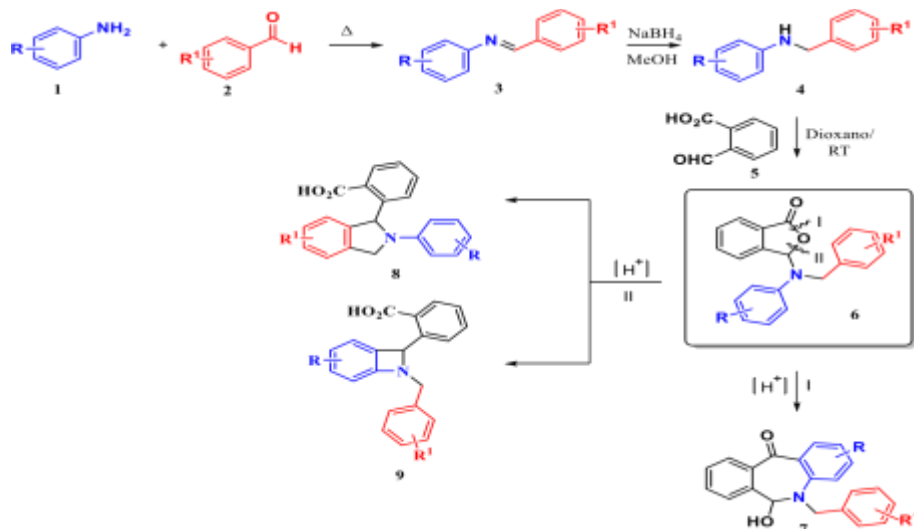
Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química,
Universidad del Valle, A.A. 25360 Cali, Colombia

*e-mail: Braulio.insuasty@gmail.com

Palabras Clave: Ácido 2-formilbenzóico, Anilinas Secundarias, Isobenzofuran-1(3*H*)-onas, Condensación

Resumen

El alto potencial biológico que encierran las isobenzofuranonas, han convertido estos sistemas en importantes andamios estructurales para el diseño y síntesis de un gran número de compuestos de comprobada utilidad. El presente trabajo está enfocado en la síntesis de una variedad de nuevas isobenzofuran-1(3*H*)-onas **6** con posible actividad antibacterial y antitumoral. Para ello inicialmente se preparó una serie de anilinas secundarias **4**, tras la reducción con NaBH₄ de las iminas **3** previamente sintetizadas mediante la condensación entre diferentes anilinas **1** y aldehídos aromáticos **2**. Posteriormente las anilinas secundarias **4** se sometieron a reacción con el ácido 2-formilbenzóico **5** para la obtención de las isobenzofuran-1(3*H*)-onas **6**. Los productos deseados se caracterizaron por espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) monodimensional (¹H, ¹³C, DEPT-135) y bidimensional (HSQC, NOESY), FT-IR, y espectrometría de masas. Una vez obtenidos los compuestos clave **6**, serán sometidos a un proceso de apertura/cierre intramolecular de anillo catalizado por ácido, con el fin de obtener nuevos sistemas heterocíclicos del tipo **7**, **8** o **9**. Los posibles productos dependerán del lugar donde ocurra la apertura y cierre intramolecular del anillo furánico.



Esquema 1. Ruta sintética para la obtención de isobenzofuran-1(3*H*)-onas **6** y posibles productos tras la apertura y cierre del anillo furánico.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE NUEVOS COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS DE 5 MIEMBROS DERIVADOS DE LA VAINILLINA CON POTENCIAL ACTIVIDAD BIOLÓGICA

Luis Alberto Illicachi*, Braulio Insuasty, Jairo Quiroga, Rodrigo Abonia

Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos
Departamento de Química, Universidad del Valle,
Cl. 13 #100-00

* e-mail: luis.illicachi@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Compuesto carbonílico α,β -insaturado, 2-pirazolina, Actividad Biológica.

Resumen

En este trabajo de investigación se sintetizaron nuevas 2-pirazolinas derivadas de las (*E*)-3-(4-(2-(dimetilamino)etoxi)-3-metoxifenil)-1-(fenilsustituido)prop-2-en-1-ona y (*E*)-3-(3-metoxi-4-((3,4,5-trimetoxibenzil)oxi)fenil)-1-(fenilsustituido)prop-2-en-1-ona. Dadas las importantes aplicaciones biológicas que presentan este tipo de compuestos. Inicialmente se realizó la síntesis de los precursores derivados de la vainillina, posteriormente estos compuestos se sometieron a reacciones con diferentes acetofenonas sustituidas en metanol y condiciones básicas de reacción a temperatura ambiente, con tiempos cortos de reacción. Obteniendo los compuestos carbonílicos α,β -insaturados IV. Finalmente los compuestos carbonílicos α,β -insaturados se utilizaron como precursores en la síntesis de nuevas 2-pirazolinas formuladas mediante reacciones de ciclocondensación haciendo uso de una metodología one-pot con hidrazina y ácido fórmico bajo calentamiento a reflujo. Los nuevos compuestos sintetizados están siendo objeto de estudios de actividad anticancerígena en el NCI de Estados Unidos, actividad anti-fúngica en la Universidad del Rosario en Argentina y actividad antibacteriana en la facultad de salud en la Universidad del Valle en Colombia y en Inglaterra.

V Simposio de Química 2015

DESCIANACIÓN MEDIANTE MICROONDAS DE MONÓMEROS EMPLEADOS EN LA SÍNTESIS DE POLÍMEROS VÍA ADMET.

Cristian Alejandro Lombo Dorado, Giovanni Rojas*,

Grupo de investigación NATURA,
Departamento de Química, Universidad Icesi^{**} - Universidad de Florida (UF),
^{**}Calle 18 No. 122-135 Pance, Cali
* e-mail: grojas@icesi.edu.co

Palabras Claves: Descianación, Química verde, Nitrilos, Microondas, Monómeros, Olefinas

Resumen

En la actualidad los polímeros están siendo estudiados cada vez más en el área de la ciencia de materiales, para encontrar aplicaciones útiles en la industria de la informática, La computación y la Química. Por lo tanto, hoy en día el campo de la síntesis de polímeros se incursiona en la investigación de nuevas vías sintéticas, para obtener polímeros funcionales aplicables en la industria. Este proyecto busca transformar vías sintéticas de polímeros en metodologías más “verdes”, esto significa utilizar procesos químicos que impliquen la reducción o eliminación de productos químicos, con el fin de ser menos perjudiciales para las personas y el medio ambiente. En un trabajo conjunto de la Universidad Icesi y la Universidad de Florida (UF), se propuso un método alternativo para realizar la descianación de monómeros utilizados en la síntesis de polímeros vía ADMET. Se utilizaron reactivos más amigables con el medio ambiente y radiación de microondas para llevar a cabo la reacción. Finalmente se obtuvo una disminución en el uso de reactivos contaminantes con rendimientos superiores al 60%.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS PIRAZOLÍNICOS DERIVADOS DEL ACIDO 1,3-DIMETILBARBITÚRICO PARA ESTUDIO DE SU ACTIVIDAD BIOLÓGICA.

S. López-Valenzuela¹, J. Ramírez-Prada¹, R. Abonia-Gonzales¹, J. Quiroga-Puello¹,
B. Insuasty-Obando^{1*}

¹Grupo de investigación de Compuestos Heterocíclicos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360 Cali, Colombia

* e-mail: braulio.insuasty@gmail.com

Palabras Claves: ácido barbitúrico, reacción de ciclocondensación, pirazolinas.

Resumen

Los compuestos heterociclos nitrogenados son la base de numerosos productos naturales así como de productos sintéticos biológicamente activos, entre ellos se encuentran compuestos derivados del ácido barbitúrico los cuales están presentes en numerosos fármacos. El ácido barbitúrico es farmacológicamente inactivo, pero sus derivados, han sido ampliamente utilizados debido a su notable actividad biológica. Un ejemplo de ello son: el amobarbital, el fenobarbital y el butabarbital. A partir de ellos se pretende obtener nuevos compuestos que presentan un amplio esquema de actividad biológica tales como analgésicas, anti-inflamatorias, anticonvulsivos y herbicidas.

Por lo tanto en este trabajo de investigación se realizó la síntesis de nuevos compuestos pirazolínicos 1-formil-5-arilidenil-3-(2'-oxobarbiturilil)-2-pirazolinas y 1-fenil-5-arilidenil-3-(2'-oxobarbiturilil)-2-pirazolinas derivados del 1,3-dimetilbarbitúrico, mediante la reacción de ciclocondensación entre chalconas de ácido barbitúrico con hidrazina y fenilhidrazina. Los compuestos obtenidos fueron caracterizados mediante espectroscopia FTIR, RMN ¹H, RMN ¹³C y espectrometría de masas.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE NUEVAS CHALCONAS Y PIRAZOLINAS QUE CONTIENEN EL FRAGMENTO 2-BUTIL-5-CLORO-1H-IMIDAZÓLICO CON POSIBLE ACTIVIDAD BIOLÓGICA

L. Tatiana Luna¹, Viviana Cuartas¹, Jairo Quiroga Puello¹, Rodrigo Abonia¹, Braulio Insuasty^{1*}

¹Grupo de investigación de Compuestos Heterocíclicos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360 Cali, Colombia

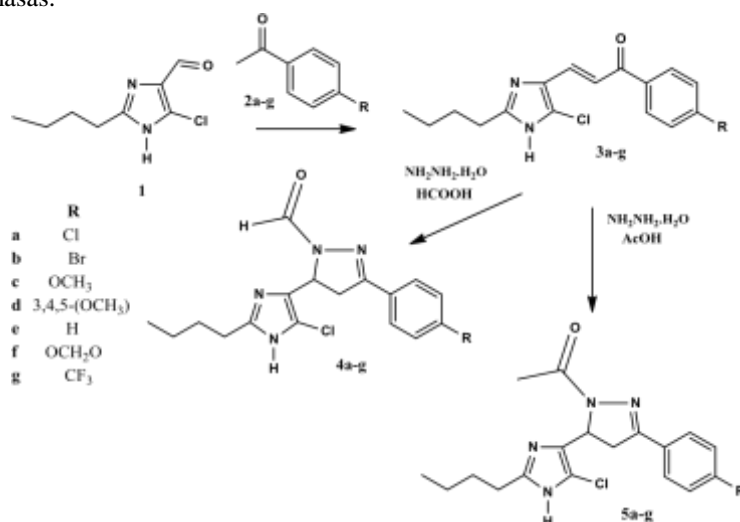
* e-mail: braulio.insuasty@gmail.com

Palabras Claves: imidazol, Compuestos α , β insaturado, Pirazolinas, síntesis.

Resumen

La síntesis de nuevas moléculas biológicamente activas es de gran interés en la química y la medicina, debido a la resistencia antimicrobiana y antifúngica que han presentado algunas especies patógenas a los medicamentos y la alta tasa de mortalidad causada por el cáncer. En este caso, las chalconas y pirazolinas son compuestos que presentan un amplio rango de actividad biológica lo que las convierte en la base para la síntesis de nuevos compuestos.

El objetivo de este trabajo es obtener chalconas que contienen el fragmento 2-butil-5-cloro-1H-imidazólico, mediante un condensación tipo Claisen-Schmidt, empleando radiación de microondas. Los compuestos α , β insaturados obtenidos se ciclaron y se funcionalizaron con monohidrato de hidrazina para obtener las Nacetil y N-formilpirazolinas. Finalmente los productos obtenidos fueron caracterizados por FTIR, RMN-¹H y ¹³C y espectrometría de masas.



V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL Y ESTUDIO SUPRAMOLECULAR DE N-(2-HIDROXI-5-METILFENIL) BENZAMIDAS.

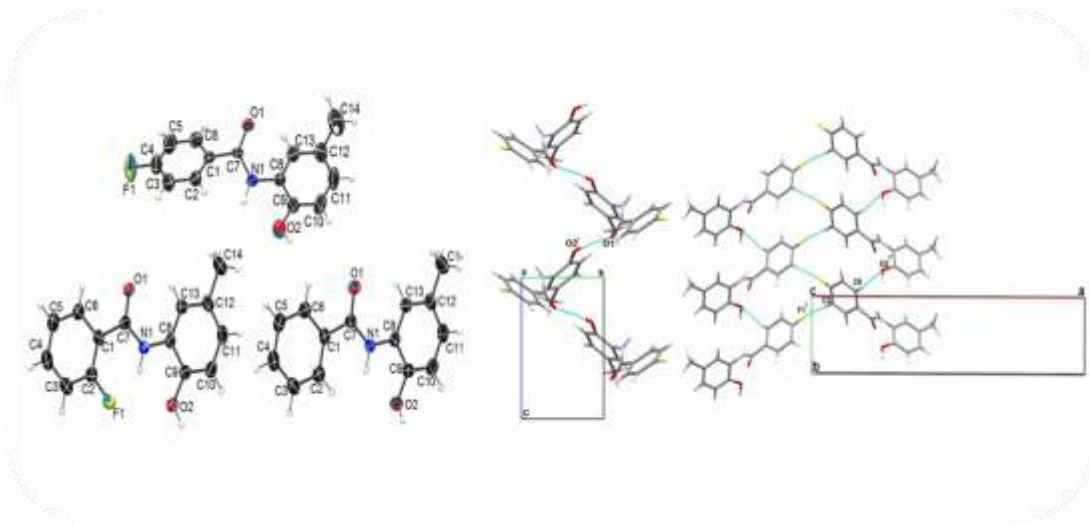
Nory J. Mariño, Rodolfo Moreno-Fuquen*

Grupo de investigación de Cristalografía,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
C1 13 # 100-00
* e-mail: rodimo26@yahoo.es

Palabras Claves: **Difracción Rayos X-Monocristal, Benzamidas, Supramolecular**

Resumen

Se presenta la síntesis, estudio estructural y supramolecular de los derivados con carácter cristalino del 2-amino-*p*-cresol. Estos derivados se sintetizaron por medio de una metodología sintética sencilla para la obtención de benzamidas. Se realizó la caracterización de los compuestos obtenidos utilizando la técnica de espectroscopia infrarrojo (ATR-FTIR). A una muestra monocristalina se le hace incidir un haz de rayos X utilizando la técnica de difracción (DRX). Se logró con ello confirmar la estructura molecular y cristalina de los compuestos sintetizados, que no habían sido reportados en la literatura; la técnica de DRX permite determinar las longitudes de enlace, ángulos de torsión, distribución espacial dentro de la celda unidad y permite explicar cómo afecta la presencia de los sustituyentes al crecimiento cristalino. Finalmente, se realizaron estudios teóricos de las frecuencias vibraciones comparando los resultados experimentales con los teóricos haciendo cálculos DFT.



V Simposio de Química 2015

Síntesis ultrasónica de nuevas pirazolo[3,4-*b*]piridinas: ventajas sobre el método de calentamiento convencional y radiación microondas.

Melissa A. Mejía, Paola A. Acosta, Jairo Quiroga*

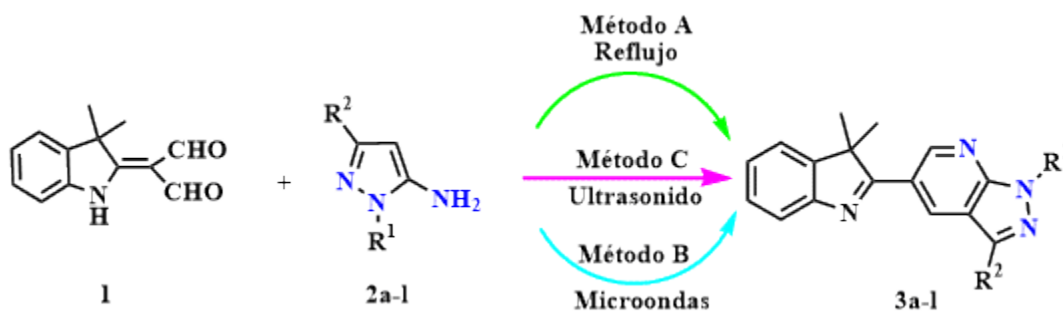
Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos
Departamento de Química, Universidad del Valle
A.A. 25360 Cali, Colombia

*Correo: jairo.quiroga@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: 5-Aminopirazoles, 2-(3,3-dimetilindolin-2-iliden)malonaldehído, radiación de microondas, ultrasonido, pirazolo[3,4-*b*]piridina.

Resumen

Se llevó a cabo la síntesis de nuevas indolilpirazolo[3,4-*b*]piridinas mediante la reacción entre 5-aminopirazoles y el 2-(3,3-dimetilindolin-2-iliden)malonaldehído usando ácido acético como disolvente. Se compararon tres métodos de calentamiento para llevarla a cabo: calentamiento convencional a reflujo (Método A), radiación por microondas (Método B) y radiación ultrasónica (Método C). Se estableció la eficacia de cada método de acuerdo a las siguientes variables: tiempo de reacción, rendimiento y pureza de los productos. El Método C fue el que proporcionó mejores resultados: tiempos cortos de reacción (8-15 min), altos rendimientos (65-90%) y alta pureza en sus productos. Se propuso una posible ruta mecanística para dicha reacción.



V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PIRAZOLINAS QUE CONTIENEN EL ANILLO TRIAZÍNICO PARA ESTUDIO DE SU ACTIVIDAD BIOLÓGICA

L.M. Moreno-López¹, J. Ramirez-Prada¹, Jairo Quiroga Puello¹, Rodrigo Abonia¹,
B. Insuasty-Obando^{1*}

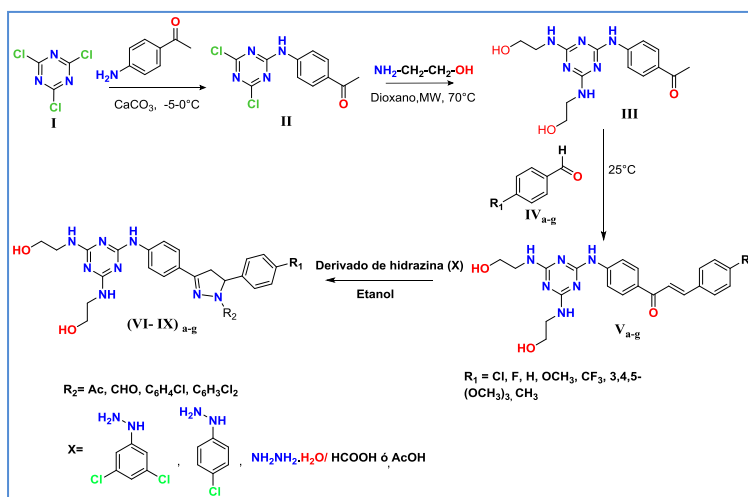
¹Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos. Departamento de Química.
Universidad del Valle. Calle13#100-00

* e-mail: braulio.insuasty@correounivalle.edu.co

Palabras Clave: Triazina, compuestos carbonílicos α,β -insaturados, sistemas pirazolínicos, nucleófilo.

Resumen

La resistencia a medicamentos antifúngicos representa un importante problema de salud a nivel mundial. Debido a la estructura eucariota común entre los hongos y los seres humanos, un número limitado de fármacos antifúngicos está disponible para fines terapéuticos. Las infecciones por diferentes especies de hongos tienen asociadas una alta tasa de morbilidad y mortalidad. Del mismo modo, el cáncer es una de las principales causas de muerte a nivel mundial. Se ha demostrado que algunos anillos



heterocíclicos actúan como farmacóforos de numerosas moléculas biológicamente activas. En especial, las pirazolininas han mostrado buena actividad antifúngica y antitumoral lo que las ha convertido en moléculas con alto interés investigativo. Este trabajo pretende contribuir en la síntesis de nuevos compuestos 2-pirazolínicos con posible actividad biológica como antitumoral y antifúngica. Para la obtención de estos compuestos se inició con el desplazamiento nucleofílico de los cloros en la 2,4,6-triclorotriazina. Primero se introdujo la 4-aminoacetofenona a bajas temperaturas y posteriormente se hizo una doble sustitución con la 2-aminoetanol empleando la técnica de microondas. Luego la acetofenona sustituida, se condensó con diferentes aldehídos sustituidos a temperatura ambiente. Los respectivos compuestos carbonílicos α,β -insaturados se ciclaron empleando derivados de hidrazina para obtener los 4,5-dihidro-1H-pirazoles. Los compuestos obtenidos en cada uno de los pasos sintéticos fueron caracterizados mediante espectroscopia FTIR, RMN ¹H, RMN ¹³C y espectrometría de masas.

V Simposio de Química 2015

SINTESIS TOTAL DE ANALOGOS DE ACHYROFURANO CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA

Kriss Pantoja Pulido^{1,2}, Carmen Romero Castro², Ana Estévez-Braun²

¹Departamento de Química, Grupo de Investigación de Productos Naturales y Alimentos, Universidad del Valle, A.A. 25360 Cali, Colombia

² Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González (CIBICAN), Universidad de La Laguna, Avda. Astrofísico Francisco Sánchez 2, 38206 La Laguna, Tenerife, España

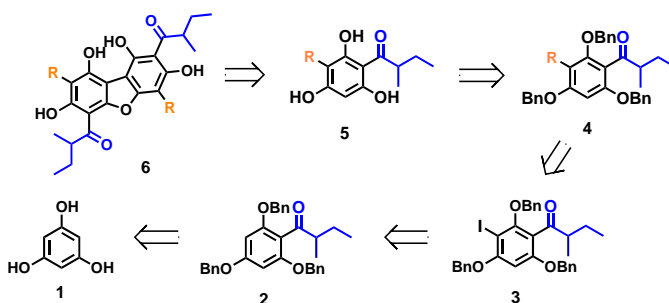
* e-mail: kriss.pantoja@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Derivados de floroglucinol, Dibenzofuranos, Actividad Antibacteriana, *Staphylococcus aureus*.

Resumen

El uso incontrolado de antibióticos de amplio espectro ha dado lugar a la aparición de resistencia bacteriana. Cepas resistentes de *Staphylococcus aureus* como MRSA y VISA son las causantes de graves infecciones en todo el mundo. Actualmente, son muchas las investigaciones dedicadas a la búsqueda de nuevos antibióticos efectivos frente a bacterias patógenas resistentes a los antibióticos actuales. En este sentido el dibenzofurano achyrofurano aislado de la planta *Achyrocline satureioides*, recientemente ha mostrado una extraordinaria actividad antibacteriana frente a bacterias gram-positivas con un MIC de 0.12 μ M para la MRSA (NRS402).^{1,2}

El presente trabajo se enfoca hacia la síntesis de análogos de achyrofurano con potencial actividad antibacteriana usando como precursor el compuesto comercial floroglucinol **1**. La acilación de Friedel-Crafts del floroglucinol bencilado seguida de yodación proporciona el compuesto **3**, el cual por medio de un acoplamiento de Suzuki da lugar a los derivados de floroglucinol **4**, los cuales bajo condiciones de desprotección de los grupos bencilos y dimerización oxidativa biomimética generan los dibenzofuranos **6**. Los análogos obtenidos han mostrado muy buena actividad antibacteriana.



- (1) Casero, C.; Machín, F; Méndez, S.; Demo, M.; Ravelo, A.G.; Pérez-Hernández, N.; Joseph-Nathan, P., Estévez-Braun, A. *J. Nat. Prod.* **2015**, *78*, 93–102
- (2) Casero, C.; Estévez-Braun, A; Ravelo, A.G.; Demo, M.; Méndez, S.; Machín, F. *Phytomedicine* **2013**, *20*, 133-138.

V Simposio de Química 2015

IDENTIFICACION Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE ISOFLAVONA Y DERIVADOS DE ACIDO CINAMICO EN EXTRACTOS ACUOSOS DE *Tithonia diversifolia* (Hemsl.) A. Gray.

Kriss Pantoja Pulido¹, Jose Isaza Martinez¹, Ana Colmenares de Velez¹

¹Grupo de Investigación de Productos Naturales y Alimentos, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle, Calle 13 No. 100-00, A. A. 25360, Cali, Colombia

e-mail: kriss.pantoja@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: *Tithonia diversifolia*, actividad antioxidante, fraccionamiento biodirigido, separaciones cromatográficas, compuestos fenólicos, derivados de ácido cinámico.

Resumen

Diversos estudios biológicos realizados a diferentes extractos y compuestos de la planta *Tithonia diversifolia* han revelado actividad antiinflamatoria, analgésica, antiviral, antimalárica, antibacteriana, antidiabética, antifúngica y actividades repelentes;¹ sin embargo, hasta el momento no se encuentran reportes de actividad antioxidante. Sus propiedades biológicas se deben a la presencia de sesquiterpenlactonas, diterpenos, flavonoides y esteroides. Por ello, en este trabajo nos concentramos en aislar e identificar los compuestos fenólicos en extractos polares de *T. diversifolia*² que presentan actividad captora de radicales libres DPPH. Hemos encontrado que los extractos butanólico (Td 2.3) y acuoso (Td 2.4) son ricos en derivados de ácido cinámico. En el fraccionamiento del extracto Td 2.3 se usó cromatografía de columna con Diaion HP-20, las fracciones fueron analizadas por HPLC-DAD. La fracción Td 2.3.1 al mostrar abundancia en fenoles fue separada con MCI-Gel CHP-20. De las fracciones obtenidas se escogió a Td 2.3.1.1 por su abundancia (211 mg), EC₅₀ (menor a 30 mg/L) y contenido total de fenoles (cercano a 60 mgAG/gES) para realizarle separación con HPLC-preparativa usando fase móvil A (H₃PO₄ 0,05%) y fase móvil B (isopropanol) y se logró aislar los compuestos Td 2.3.1.1.2 y Td 2.3.1.1.7, los cuales están parcialmente elucidados por RMN 1D y 2D.

- (1) Chagas-Paula, D.; Oliveira, R.; Rocha, B.; Da Costa, F. *Chem. Biodivers.* **2012**, *9*, 210–235.
- (2) Zhao, G.-J.; Xia, Z.-X.; Chen, W.-S.; Lib, X.; Sunc, L.; Sun, L.-N. *Biochem. Syst. Ecol.* **2012**, *44*, 250–254.

V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE NUEVAS CHALCONAS Y PIRAZOLINAS QUE CONTIENEN EL FRAGMENTO 2-BUTIL-5-CLORO-1H-IMIDAZÓLICO PARA SU ESTUDIO DE ACTIVIDAD BIOLÓGICA

F. Stiven Polo¹, Jaime Galvez¹, Jairo Quiroga Puello¹, Rodrigo Abonia¹,
Braulio Insuasty^{1*}

¹Grupo de investigación de Compuestos Heterocíclicos,
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360 Cali, Colombia

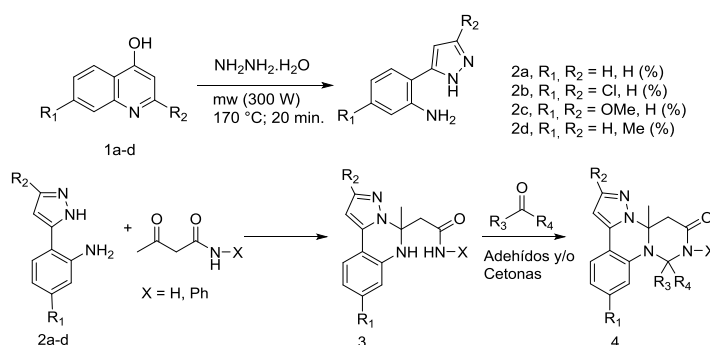
* e-mail: braulio.insuasty@gmail.com

Palabras Claves: Pirazolilanalinal, quinazolinas, actividad biológica, síntesis.

Resumen

Actualmente existen muchos problemas de salud críticos relacionados con diferentes enfermedades, como es el cáncer, el cual cobra millones de vidas anualmente. Otro tipo de problemas de salud son las enfermedades asociadas con los hongos patógenos, dado que la mayoría de fármacos utilizados para su tratamiento generan efectos secundarios, y algunos de los microorganismos generan fármaco-resistencia, lo cual explica los altos índices de mortalidad en algunos países. Las quinazolinas fusionadas a heterocíclicos nitrogenados como las pirazolo[1,5-*c*]quinazolinas son de particular interés en la química medicinal debido a que han presentado un amplio espectro de actividad biológica.

Este trabajo pretende aportar con la obtención de nuevos compuestos heterocíclicos fusionados que contienen el sistema pirazoloquinazolínico en su estructura, que surgen como una posible alternativa para la solución de problemas de salud asociado a diversas enfermedades. Se estudió la reacción entre derivados de la pirazolo[1,5-*c*]quinazolina con diferentes aldehídos y/o cetonas. Inicialmente se obtuvo como precursores diferentes pirazolilanalinas mediante de la reacción entre 4-hidroxiquinolinas con hidrato de hidracina. Posteriormente se planteó la reacción de pirazolilanalinas con acetoacetanilida, acetoacetamida que permitieron la formación de un nuevo anillo para la obtención de compuestos policíclicos. Para ello se implementaron metodologías sintéticas asequibles, que requirieron condiciones suaves de reacción.



V Simposio de Química 2015

SÍNTESIS DE DERIVADOS DE 4-AMINOQUINOLINA Y 4-AMINOPIRIDINA PARA ESTUDIO DE SU ACTIVIDAD BIOLÓGICA

J. Ramírez-Prada*, A. Montoya-Arias, J. Quiroga-Puello, R. Abonia-González, B. Insuasty-Obando

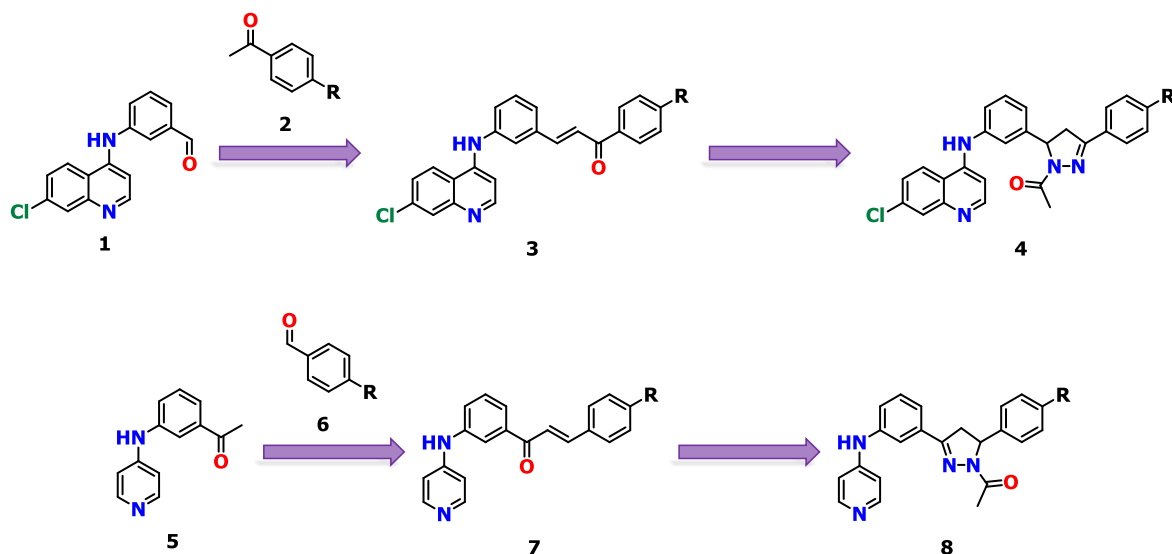
Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad del Valle

* e-mail: jonathan.ramirez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **Compuestos carbonílicos α,β -insaturados, 4-amino-7-cloroquinolina, 4-aminopiridina, sistemas pirazolónicos y diazepínicos**

Resumen

A nivel mundial, alrededor de 3,3 billones de personas están expuestas a la malaria. En 2013 hubo unos 198 millones de casos de la enfermedad, que costaron la vida de 58400 personas aproximadamente y aunque la intensificación de las medidas de prevención y control se ha traducido en una reducción de las tasas de mortalidad por malaria, cada vez los parásitos se hacen más resistentes a los antimaláricos existentes. Por lo tanto, gran parte de la investigación científica moderna tiene como objetivo la obtención de compuestos con actividad biológica de este tipo. Entre ellos, los compuestos carbonílicos α,β -insaturados, las pirazolininas y las diazepinas surgen como una solución trascendental a estos problemas. Por lo anterior, el objetivo de este trabajo, fue obtener nuevas chalconas, pirazolininas y diazepinas que contengan los farmacóforos 4-amino-7-cloroquinolina, 4-amino-7-trifluorometilquinolina y 4-aminopiridina, por medio de la reacción de un agente dinucleofílico nitrogenado sobre compuestos carbonílicos α,β -insaturados. Se concluye, que a partir de los compuestos obtenidos, es factible realizar futuras reacciones de ciclocondensación que permitan obtener una gran gama de sistemas heterocíclicos de 5, 6 y 7 miembros con posible actividad antitumoral y antimalárica y que conlleven a estudios posteriores para realizar síntesis dirigida.



Referencias:

- [1] B. Insuasty, A. Montoya, D. Becerra, J. Quiroga, R. Abonia, S. Robledo, I. D. Vélez, Y. Upegui, M. Nogueras, J. Cobo, *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, 67, 252-262.
- [2] B. Insuasty, J. Ramírez, D. Becerra, C. Echeverry, J. Quiroga, R. Abonia, S. M. Robledo, I. D. Vélez, Y. Upegui, J. A. Muñoz, V. Ospina, M. Nogueras, J. Cobo, *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, 93, 401-413.

V Simposio de Química 2015

SINTESIS DE NUEVOS SISTEMAS BASADOS EN TRIFENILAMINA Y FURANO USANDO COMO FRAGMENTO ELECTRO-ACEPTOR EL FULLERENO C₆₀

F. Rodríguez-González^{1*}, A. Ortiz-González¹, B. Insuasty-Obando¹

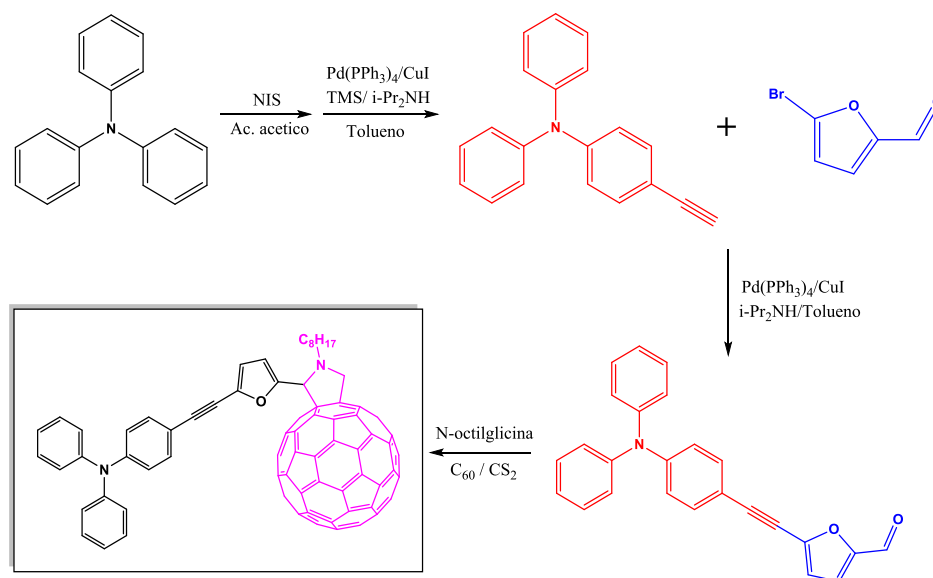
Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos,
¹Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360. Cali, Colombia

* e-mail: fabian.rodriguez.gonzalez@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Trifenilamina, DSSC, transferencia electrónica.

Resumen

La fuerte demanda energética y el uso de recursos no renovables como el petróleo, ha llevado a plantear diferentes alternativas para poder obtener fuentes energéticas inagotables, limpias y de bajo costo. Las celdas solares sensibilizadas por pigmentos o también conocidas como celdas de Grätzel es una de ellas, las cuales convierten la luz solar en electricidad mediante fotosíntesis artificial de algunos compuestos del tipo Donor- π -Aceptor. En el presente trabajo reportamos la síntesis y el análisis espectroscópico de un compuesto de transferencia de carga usando como unidad donora la Trifenilamina, para mejorar sus propiedades ópticas se hizo uso de un espaciador rico en electrones como es el furano unido covalentemente al aceptor electrónico fulleropirrolidina mediante la reacción de Prato para finalmente formar el compuesto con estructura del tipo Donor-Cable-Aceptor (D- π -A). Finalmente, la caracterización estructural se llevó a cabo mediante las técnicas espectroscópicas FT-IR, RMN-¹H, RMN-¹³C, DEPT-135 y espectrometría de masas.



V Simposio de Química 2015

SINTESIS INDUCIDA POR RADIACION DE MICROONDAS DE PIRAZOLO[3,4-*b*]AZEPINAS CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE

Pablo E. Romo Valdés^a, Braulio Insuasty^a, José Hipólito Isaza^b, Jairo Quiroga^{a*}

^a Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, ^b Grupo de Investigación en Productos Naturales y Alimentos.

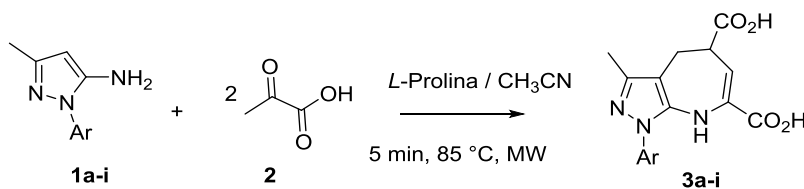
Departamento de Química, Universidad del Valle,
A.A. 25360 Cali, Colombia

* e-mail: jairo.quiroga@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: **pirazolo[3,4-*b*]azepinas, microondas, antioxidante.**

Resumen

Se llevó a cabo la síntesis de nuevas pirazolo[3,4-*b*]azepinas **3a-i** mediante la reacción entre 5-aminopirazoles **1a-i** y ácido pirúvico **2** bajo radiación de microondas y *L*-prolina como catalizador con rendimientos de reacción entre 35-76 %. La metodología desarrollada permitió la obtención de nuevos productos de manera rápida, de alta pureza, minimizando así costos y tratamientos posteriores de purificación. Las estructuras de las nuevas pirazoloazepinas **3a-i** se determinaron con base en el análisis de sus espectros de IR, RMN (¹H y ¹³C) y espectrometría de masas. La actividad antioxidante se evaluó frente al DPPH y se encontraron valores de EC₅₀ entre 14.0-45.4 mg/L cercanos al EC₅₀ (4.5 mg/L) del ácido ascórbico.



Esquema 1. Síntesis de pirazolo[3,4-*b*]azepinas **3a-i**.